



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**Simulaciones Numéricas de Columnas
Granulares Formadas por Partículas
Alargadas.**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA:

Horacio Tapia McClung

DIRECTOR DE TESIS: Roberto Zenit Camacho



posgrado en ciencias físicas
u n a m

Ciudad Universitaria

Diciembre, 2009



Universidad Nacional
Autónoma de México

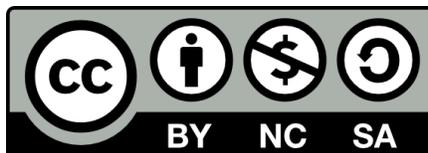


UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



El autor, sin perjuicio de la legislación de la Universidad Nacional Autónoma de México, otorga a esta obra la siguiente licencia:

Esta obra está licenciada bajo una **Licencia Atribución-No Comercial-Licenciamiento Recíproco 2.5 México** de Creative Commons. Para ver una copia de esta licencia, visite

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/mx/>

o envíenos una carta a

Creative Commons
171 Second Street, Suite 300,
San Francisco, California,
94105, USA.

*A Martha.
Con todo mi cariño,
porque siempre supo que llegaría el día...
te amo.*

RESUMEN

SIMULACIONES NUMÉRICAS DE COLUMNAS GRANULARES FORMADAS POR PARTÍCULAS ALARGADAS.

Horacio Tapia McClung

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Maestro en Ciencias

Este trabajo presenta los resultados numéricos de simulaciones en dos dimensiones del colapso de columnas granulares formadas por granos alargados, usando el Método del Elemento Discreto. Se encontró que la distancia final recorrida por los depósitos al término del colapso sigue una relación monotonía de la forma $\sim a^p$ con el parámetro $a = \frac{H_0}{R_0}$, donde H_0, R_0 son la altura y el radio inicial de la columna, similar al caso de columnas formadas por granos circulares. Para los granos alargados con una razón entre el largo y el ancho de 1:5 (formados de $N_l = 5$ granos circulares constreñidos a una geometría lineal), se encontró $p \sim 0.50 \pm 0.04$, comparado con $p \sim 0.57 \pm 0.02$ para los granos simples. Concluimos que existe una diferencia cualitativa entre los colapsos de columnas granulares debido a la forma alargada de los granos de los que están hechas.

ABSTRACT

NUMERICAL SIMULATIONS OF GRANULAR COLUMNS MADE OF ELONGATED PARTICLES.

Horacio Tapia McClung

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Maestro en Ciencias

This work presents the results of numerical simulations in two dimensions of the collapse of granular columns made of elongated particles using the Discrete Element Method. The results show that the final distance travelled by the grains at the end of the collapse follow a monotonic relation of the form $\sim a^p$, where $a = \frac{H_0}{R_0}$ is the relevant parameter, and H_0, R_0 are the initial height and radius of the column respectively. For elongated particles with a length-to-width ratio of 1:5 (made of $N_l = 5$ circular grains constrained to a linear geometry), the exponent for the scaling law was found to be $p \sim 0.50 \pm 0.04$, compared with $p \sim 0.57 \pm 0.02$ for the single grain columns. We conclude that there is a qualitative difference between the collapses of granular columns due to the elongation of the grains that comprise them.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo no hubiera sido posible sin la ayuda incondicional de Roberto Zenit, director de tesis. A él le agradezco haber abierto las puertas de su laboratorio para poder llevar a cabo esta investigación y bajo su tutela concluirla. No puedo dejar de agradecer a los amigos de siempre, Nettel, Mario, Javier, Stella, Sergio, Gisela, Martha, Carmen, Carla, Camilla, Alex, Alex, Sanaz, bueno a tod@s los que han tenido que ver con este proceso de alguna u otra forma. De manera especial quiero agradecer a mi familia, la inmediata y la cercana, Emily y Horacio, mis papás, de quienes siempre he recibido todo el apoyo; a Rodrigo, mi hermano quien ha sido una compañía por ésta larga travesía; a Martha y Lauro, mis suegros y especialmente a Martha mi esposa y compañera de vida y guía de rumbo, quién además siempre me impulsó y apoyó para que culminará este esfuerzo y no lo dejara atrás en el recuerdo. ¡Gracias Martha!

Al grupo de estudiantes de Roberto, René, Federico, Charly, Enrique(s), Adriana, Diego, Ernesto, Santos, Rodrigo, Mónica, a tod@s gracias por hacer del laboratorio un ambiente grato para trabajar y compartir ideas. Quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México por, nuevamente, brindarme sus espacios y recursos a cambio de solamente poner un granito más para colaborar en el servicio de esta gran Institución en el desarrollo de nuestra gran Nación, y al Instituto de Investigaciones en Materiales, IIM, de la UNAM, donde se llevo a cabo parte del

trabajo.

Esta tesis no hubiera sido posible sin la gran ayuda de Yanalté Herrero, del Posgrado de Ciencias Físicas. A ella le dedico unas líneas de agradecimiento por facilitarme todo el proceso y llevar a buen término este esfuerzo. La felicito por el cariño con el que atiende a todos los estudiantes que siempre le hacen visitas preguntándole por algún proceso y les ayuda a sortear los caminos para hacerles el paso por el posgrado más fácil. Gracias también a la coordinación del Posgrado en Ciencias Físicas, en la persona del Dr. Manuel Torres.

Finalmente, agradezco a los miembros del comité y jurado que examinaron este trabajo y cuyos comentarios contribuyeron a mejorarlo: Dr. Roberto Zenit, Dra. Clara Garza, Dr. Gabriel Caballero, Dr. Gerardo Ruiz y Dr. Enrique Geffroy.

Redacción y edición de tesis
con $\text{\LaTeX}2_{\epsilon}$, *GNU Emacs*
y sistema operativo libre
GNU/LINUX.

ÍNDICE GENERAL

1. Introducción	1
2. El Colapso de una Columna Granular	9
2.1. Experimentos del Colapso de Columnas Granulares	10
3. Modelo Numérico	17
4. Resultados	35
4.1. Resultados para granos con $N_l = 1$	40
4.2. Resultados para granos con $N_l = 5$	46
5. Discusión y conclusiones	55
Bibliografía	59

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. Algunos ejemplos de medios granulares.	2
2.1. Estado inicial del experimento original del colapso de una columna granular ([12]).	11
2.2. Estado final del experimento original del colapso de una columna granular ([12]).	11
2.3. Colapso cuasi-bidimensional de una columna rectangular ([13]). . .	12
3.1. Esquema del contacto mecánico.	23
3.2. Esquema de la composición de granos alargados a partir de granos circulares.	30
3.3. Esquema de la constricción de N_l partículas sobre una línea.	31
4.1. Preparación típica de una columna. $R_0 = 35d_i$, $N_l = 1$	36
4.2. Ejemplo típico de un estado inicial.	38
4.3. Inicio del colapso en una simulación típica con granos circulares. . .	39
4.4. Distancia final recorrida en la dirección horizontal como función del parámetro a para granos circulares.	42
4.5. Figura que muestra la curvatura sobre la superficie en el perfil del colapso de columnas con $N_l = 1$	45
4.6. Figura que muestra la curvatura sobre la superficie en el perfil del colapso de una columna con $N_l = 5$	47

4.7.	Figura que muestra la curvatura sobre la superficie del depósito en el perfil del colapso de columnas con $N_l = 5$	48
4.8.	Colapso de una columna con $N_l = 5$ y a grande donde se observa el desprendimiento de los granos al principio del colapso durante la caída libre.	49
4.9.	Distancia final recorrida en la dirección horizontal como función del parámetro a para granos alargados con $N_l = 5$	52

ÍNDICE DE CUADROS

3.1.	Valores de los parámetros del modelo empleados en las simulaciones.	33
4.1.	Propiedades geométricas de las columnas simuladas para los casos N_l estudiados. En el caso $l = 1$ hay un total de $N = 2000$ partículas, mientras que en el caso $l = 5$ hay un total de $N = 5 \times 2000 = 10^3$ partículas.	37
4.2.	Valores de a y de la distancia final recorrida en la dirección horizontal para $N_l = 1$ ($N_{tot} = 2000$ granos).	41
4.3.	Valores de a y de la distancia final recorrida en la dirección horizontal para $N_l = 5$ ($N_{tot} = 10000$ granos).	51

CAPÍTULO 1

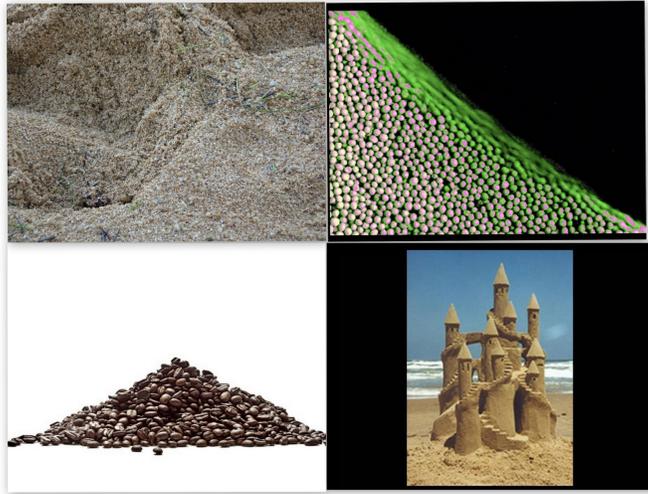
Introducción

Los medios granulares son ubicuos y fundamentales en una gran cantidad de fenómenos naturales y en procesos antropogénicos. Muchos de éstos involucran pilas estáticas de material acumulados o el flujo colectivo de partículas en escalas espaciales que van desde milímetros hasta varios kilómetros (figura 1.1(a)).

Estas dos características de los medios granulares, la tendencia a permanecer estáticos o en movimiento son importantes en procesos naturales como la erosión o la sedimentación, o eventos catastróficos como las avalanchas o erupciones volcánicas [12].

A pesar de ser tan comunes, el comportamiento de estos sistemas, formados principalmente por colecciones de muchas partículas individuales, está lejos de ser simple y completamente entendido. Desde el sencillo, pero importante problema de la distribución de la presión en una pila estática de material granular, hasta los

INTRODUCCIÓN



(a) Diversidad de escalas



(b) Fenómenos a gran escala.

Figura 1.1: Algunos ejemplos de medios granulares.

complejos flujos que se observan en sistemas en movimiento, las explicaciones y teorías no describen de manera completa ni satisfactoriamente las observaciones y en muchas ocasiones las predicciones siguen siendo un reto [7, 8].

Debido a la falta de un modelo teórico similar al de los fluidos newtonianos o los sólidos hookeanos, el trabajo en medios granulares se ha enfocado en el análisis de flujos simples que permitan acercarse a un entendimiento básico. Uno de ellos, que ha recibido mucha atención en años recientes debido a su sencillez y a la rica dinámica que se observa [3, 10, 12, 13, 15, 21], es el colapso de una columna granular. Este sencillo experimento en parte está inspirado por flujos de masa en los que domina la fase granular, por ejemplo en eventos geofísicos como avalanchas o deslaves de rocas, o en derrumbes de un acantilado, en el que la roca se desploma y una parte del material que cae constituye un flujo granular que se dispersa por su propio peso (figura 1.1(b)). De este modo, este experimento sirve como un paradigma para el estudio de los procesos que se pueden observar en estos fenómenos a grandes escalas y forma parte de los retos en el desarrollo de modelos de medios granulares.

El experimento consiste en liberar una columna, generalmente cilíndrica, formada por algún material granular simple como arena, semillas, balines, o formas similares, sobre una superficie horizontal y estudiar el proceso que lleva al depósito final. Se ha encontrado que el estado final de los depósitos, por ejemplo la distancia total recorrida sobre la superficie horizontal, la altura y forma final o el tiempo total del colapso, depende únicamente del cociente entre la altura (H_0) y el radio (R_0) inicial de la columna. A dicho cociente se le denota *parámetro a* en la literatura [3, 9, 10, 12, 13, 15, 21], y se define como $a = \frac{H_0}{R_0}$ (figura 2.1). Estas variables usadas para caracterizar el estado final de los depósitos proporcionan información estática del colapso; sin embargo, también es posible realizar mediciones que permiten

INTRODUCCIÓN

estudiar la dinámica del proceso.

Los estudios experimentales parecen indicar que la distancia final recorrida por el depósito, que denotaremos por R_∞ , así como la altura final, para la cual usaremos H_∞ , dependen únicamente del parámetro a y no de las propiedades físicas o de las características particulares de los granos utilizados [3, 9, 10, 12, 13]. Incluso se ha reportado que las mediciones de los depósitos finales son independientes del tipo de substrato empleado para la superficie horizontal sobre la que ocurre el colapso o del tamaño de los granos empleados [10], así como de la forma de los mismos. Las mediciones sugieren que las propiedades finales de los depósitos siguen leyes de escalamiento de acuerdo a una ley de potencias con el parámetro a de la forma $\Pi \sim a^p$, donde Π es la propiedad que se está considerando.

Entre los distintos trabajos en el tema no hay un acuerdo claro acerca de si el proceso depende únicamente de la geometría inicial o si existen otros parámetros que afectan los resultados observados. Algunos estudios [10, 12] indican que el tipo de material empleado es irrelevante y que el colapso no depende de la fricción entre partículas y contenedores, debido a que el efecto de la fricción sólo se observa durante la fase final del proceso y no durante la fase donde dominan las avalanchas. Así mismo, los trabajos indican que el colapso no depende del tamaño de los granos usados ya que los datos de los depósitos finales para distintos granos, debidamente reescalados, se colapsan en la misma curva.

Llama la atención que los trabajos que usaron granos con una estructura alargada no reportan diferencias observables en los colapsos, tal vez porque los estudios no buscaban establecer la existencia de diferencias con esta variable. Lo cierto es que en otros sistemas y configuraciones que involucran medios granulares sí puede establecerse una clara diferencia dependiendo de la estructura de los granos empleados. Por ejemplo, en experimentos en los cuales se colocan barras dentro de

un tambor cilíndrico horizontal en rotación, puede observarse una transición de fase de un estado desordenado a uno ordenado en una dirección preferencial determinada por la velocidad de rotación y la longitud de las barras [4, 20]. En esta configuración es evidente que el comportamiento del sistema es exclusivo del uso de granos alargados (barras). Otro sistema interesante en el cual el resultado depende de la estructura de los granos es en la *criticalidad auto-organizada* o SOC por sus siglas en inglés (*Self-Organized Criticality*) en avalanchas. Los fenómenos de SOC se presentan en sistemas forzados que suelen alcanzar un estado crítico independientemente del valor de parámetros de control. En un estudio detallado se comprobó que las avalanchas que se generan en una pila de arroz exhiben SOC únicamente para granos suficientemente largos [6].

Lo anterior nos orilla a pensar que el efecto de la estructura de los granos se observa en el proceso dinámico más que en las configuraciones estáticas iniciales y finales. Como hemos mencionado, los resultados experimentales están restringidos a las observaciones iniciales y finales del proceso (lo mismo en el caso de los fenómenos naturales que han inspirado estos estudios) y en algunos casos, haciendo uso de la tecnología y técnicas experimentales, es posible observar lo que sucede durante el proceso del colapso y estudiarlo a detalle. Sin embargo no es posible tener un conocimiento preciso del estado completo del sistema (en términos de la información de las posiciones y velocidades de las partículas involucradas en el fenómeno) y es aquí donde el uso de técnicas computacionales ha sido una herramienta importante para el avance en el estudio de este tipo de problemas.

Haciendo uso de simulaciones que numéricamente integran las ecuaciones de movimiento (dadas por la Segunda Ley de Newton) de cada partícula en un sistema que interactúa por medio de fuerzas prescritas, es posible reproducir el comportamiento general del colapso y obtener resultados similares a los de los ex-

INTRODUCCIÓN

perimentos [9]. Una ventaja indiscutible de realizar simulaciones numéricas es, a diferencia de los experimentos, el acceso directo a toda la información del sistema en cada instante del intervalo temporal en el que se simula el proceso.

Así como en los trabajos experimentales, la mayoría de los estudios numéricos han omitido los efectos de la estructura de los granos utilizados. Típicamente las simulaciones de medios granulares por estos métodos emplean discos (esferas en tres dimensiones) para representar granos ideales, haciendo que los algoritmos y los cálculos sean simples y eficientes. En el caso de simulaciones de granos alargados, se requiere una mayor capacidad computacional y el desarrollo de técnicas y algoritmos adecuados ha sido lento. Algunos estudios emplean cuboides y elipsoides pero el costo computacional es demasiado elevado [5], obligando a usar pocas partículas para las simulaciones. Otros estudios han incorporado potenciales del tipo molecular con variaciones espaciales en las distintas direcciones radiales que efectivamente simulan elipsoides; sin embargo, este tipo de potenciales pueden introducir vibraciones espurias que alteran los resultados si no se es cuidadoso.

En esta investigación se presentan resultados de simulaciones numéricas del colapso de columnas granulares que muestran diferencias cuantificables entre los colapsos de columnas formadas por granos circulares (discos) y granos alargados. En el primer capítulo después de la Introducción, se hace una revisión del problema del colapso de columnas granulares remarcando los resultados más importantes y los relevantes para esta exposición. En el segundo capítulo se presenta el método numérico empleado para realizar las simulaciones, discutiendo las fuerzas de contacto y los algoritmos para la integración de las ecuaciones de movimiento.

El tercer capítulo contiene los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas. Este capítulo está dividido en tres partes: la primer sección contiene los resultados

de colapsos de columnas formadas por granos circulares (discos), la segunda de columnas formadas por granos alargados, y la tercera puntualiza las diferencias que se han observado entre los colapsos en ambos casos. Finalmente en el cuarto capítulo se discuten los resultados obtenidos y se plantean perspectivas para futuras investigaciones.

CAPÍTULO 2

El Colapso de una Columna Granular

Una de las configuraciones más simples en las que puede desarrollarse un flujo granular en ausencia de otras fuerzas externas (además de la aceleración debido a la gravedad cerca de la superficie terrestre), es el colapso de una columna granular. Este experimento puede verse como un paradigma de fenómenos como sedimentación, erosión o situaciones catastróficas como avalanchas y deslaves. Detrás de la sencillez del experimento se oculta una compleja y rica dinámica que, como muchos otros fenómenos que involucran medios granulares, da lugar a resultados que aún no están bien entendidos.

Las primeras investigaciones que se llevaron a cabo con estos experimentos se enfocaron primordialmente en describir detalladamente el esparcimiento y las características del estado final del depósito partiendo de una configuración inicial controlada, en la cual se varió el material empleado (tipo de grano), la altura y el

radio inicial de la columna y el tipo de superficie sobre la que ocurre el colapso. Los resultados más importantes y relevantes de los experimentos y la descripción general del proceso del colapso se resumen en este capítulo. Así mismo, se introduce la notación que será empleada en el resto de este trabajo.

2.1. Experimentos del Colapso de Columnas Granulares

Los experimentos originales [10, 12], que consisten en un contenedor cilíndrico de radio R_0 , lleno de material granular (arena, sal, arroz, etc.) hasta una altura inicial H_0 , se muestra en las figuras 2.1 y 2.2. Al inicio del experimento el cilindro se quita rápidamente (por medio de un mecanismo que garantiza que la velocidad a la cual se quita el contenedor es siempre la misma) causando así el flujo del material granular en dirección radial (figura 2.2). Cuando el material alcanza el reposo se determinan la distancia final recorrida en dirección radial, R_∞ , y la altura final del depósito, H_∞ .

En una variante del experimento original en que se usan contenedores rectangulares [3, 9, 13], el proceso es similar pero la distancia final del depósito se mide a partir de la posición original de la pared. En este caso una compuerta se levanta lo cual permite que el material fluya en una dirección (figura 2.3). En ambos experimentos se encontró que las cantidades que caracterizan el estado final de los depósitos, R_∞ y H_∞ , no dependen del tipo de material granular empleado y por lo tanto son independientes del coeficiente de fricción del sistema.

De hecho se encontró que estas cantidades dependen solamente de la razón entre la altura y el radio inicial de las columnas, el parámetro a , $a = \frac{H_0}{R_0}$, por medio

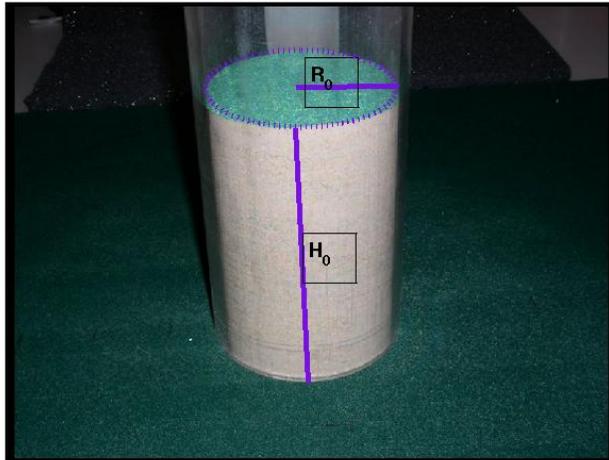


Figura 2.1: Estado inicial del experimento original del colapso de una columna granular ([12]).

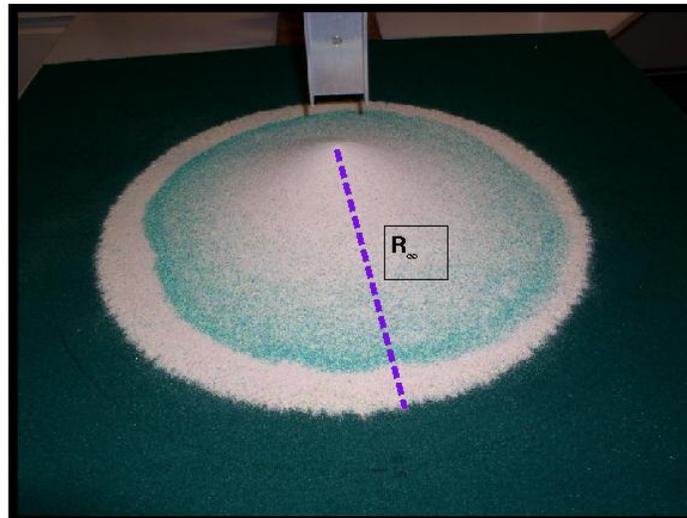


Figura 2.2: Estado final del experimento original del colapso de una columna granular ([12]).

de una ley de potencias, $\sim a^p$, en la que el exponente p varía dependiendo del intervalo de valores de a como veremos más adelante. Esto indica que existe una ley de escalamiento distinta para distintos valores de a ; en otras palabras, la ley de escalamiento es distinta para distintas geometrías iniciales.

A partir de este momento nos enfocaremos únicamente en colapsos de colum-

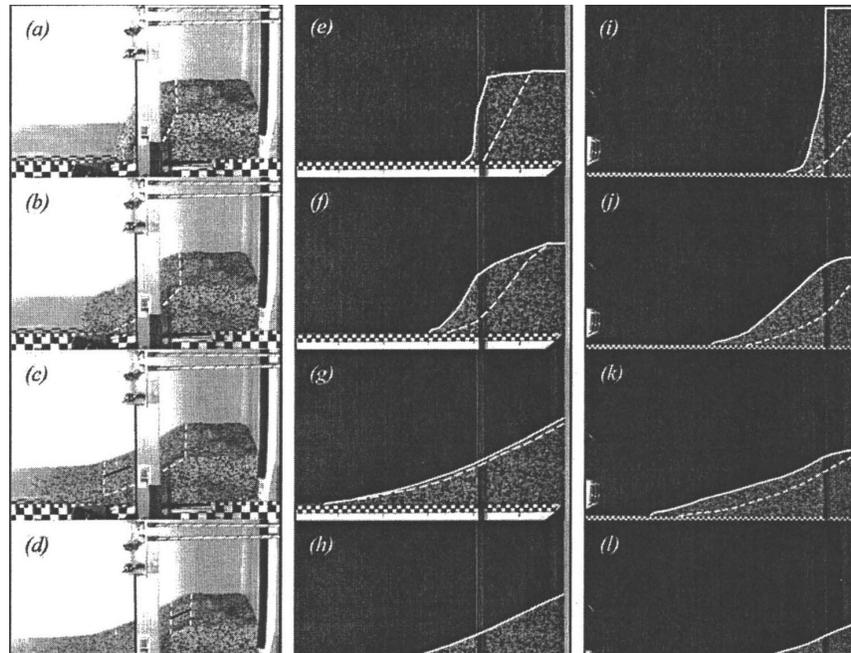


Figura 2.3: Colapso cuasi-bidimensional de una columna rectangular ([13]).

nas granulares basados en experimentos cuasi bidimensionales y en simulaciones bidimensionales, sin olvidar que a pesar de las evidentes diferencias con el caso axisimétrico, el resultado fundamental para nuestro trabajo es que en ambos casos los resultados dependen únicamente de a y la dependencia es del tipo de ley de potencias.

El proceso general del colapso difiere dependiendo del parámetro $a = H_0/R_0$. Para columnas muy anchas y de poca altura ($a < 1$), el colapso ocurre sobre un plano de deslizamiento bien definido y sólo los granos que se encuentran en las orillas de la columna participan en el colapso. Conforme se incrementa el valor de a , el ángulo, con respecto a la horizontal, del plano sobre el que ocurre el colapso aumenta y se hace cada vez menos definido, al tiempo que más partículas de la columna participan del colapso. Para valores intermedios de a , el colapso ocurre sobre los planos, creando una pila cónica con un grupo de partículas que permanecen inmóviles durante el proceso; la forma del cono está relacionada con

las propiedades de fricción del material empleado [10].

2.1.1. Resumen de los resultados experimentales

La observación de que los valores que caracterizan el estado final de los depósitos dependen solamente del parámetro a se ha comprobado por diversos grupos experimentales y a continuación indicaremos las relaciones que se han encontrado. En todos los casos, la relación entre las cantidades de interés y a siguen una ley de potencias de la forma $\sim a^p$. Uno de los experimentos originales con columnas cilíndricas[12] reporta que, independientemente del material usado (arena, sal, arroz, couscous y azúcar),

$$\frac{R_\infty - R_0}{R_0} \simeq \begin{cases} 1.24a & a \lesssim 1.7 \\ 1.6a^{1/2} & a \gtrsim 1.7 \end{cases}$$

Otro de los experimentos originales, también con columnas cilíndricas [10] formadas con cuentas de vidrio de 350 y 1150 μm de diámetro, encontró una dependencia similar para el cociente $\frac{R_\infty}{R_0}$ con a :

$$\frac{R_\infty - R_0}{R_0} \propto \begin{cases} a & a < 0.74 \\ a^{1/2} & a > 0.74 \end{cases}$$

En uno de los experimentos en una configuración rectangular, en la que también se estudia el efecto de la profundidad variando la separación entre las paredes, [3] se reporta que

$$\frac{R_\infty - R_0}{R_0} \simeq \begin{cases} \lambda a^{0.65} & \text{canal estrecho (cuasi bidimensional)} \\ \lambda a^{0.9} & \text{canal ancho} \end{cases}$$

en donde el valor del parámetro λ depende de las propiedades del material usado. Otro experimento cuasi bidimensional [13] reporta que

$$\frac{R_{\infty} - R_0}{R_0} \simeq \begin{cases} 1.2a & a \lesssim 2.3 \\ 1.9a^{2/3} & a \gtrsim 2.3 \end{cases}$$

Finalmente, [9] confirma que en un sistema cuasi-bidimensional se observan todos los detalles de colapsos cilíndricos, en particular la dependencia en a de la distancia final recorrida por la columna sigue una ley de potencias:

$$\frac{R_{\infty} - R_0}{R_0} \simeq \begin{cases} a & a \lesssim 2.2 \\ a^{0.72} & a > 2.2 \end{cases}$$

Como puede verse de los resultados presentados, hay una diferencia en las leyes de escalamiento para la distancia final que se esparce la columna entre configuraciones cuasi-bidimensionales y axisimétricas (3 dimensiones), pero en todos los casos se distinguen al menos dos formas diferentes de escalamiento como función de a .

2.1.2. Resumen de los resultados numéricos

También se han obtenido resultados importantes y comparables con los experimentales por medio de simulaciones numéricas. Aunque existen diversas técnicas numéricas útiles para el problema, nos enfocaremos en aquellos trabajos que utilizan modelos similares a los que se usaron en este trabajo. Estos métodos se conocen genéricamente como *Método del Elemento Discreto* (MED). El método será discutido a detalle en el capítulo siguiente. En particular, uno de los trabajos más

relevantes [15] encontró que las leyes de escalamiento son acordes a los resultados experimentales:

$$\frac{R_{\infty} - R_0}{R_0} \simeq \begin{cases} 2.5a & a \lesssim 2 \\ 3.25a^{0.705} & a \gtrsim 2 \end{cases}$$

Los prefactores difieren entre los obtenidos en [3] debido, entre otras razones, a propiedades como la fricción, el uso de granos circulares en las simulaciones y el hecho que los experimentos cuasi bidimensionales son en tres dimensiones[15]. Este trabajo numérico sugiere que la existencia de dos leyes de escalamiento distintas para la distancia final recorrida puede explicarse por la presencia de una fase de caída libre durante el colapso de la columna, dependiendo del valor de a . Así mismo, durante el colapso, hay una eyección de masa, que puede observarse mejor para valores altos de a , que contribuye de manera significativa al esparcimiento de la columna. Este mecanismo puede ser el responsable de las diferencias entre leyes de escalamiento en configuraciones cuasi-bidimensionales y axisimétricas [15].

Finalmente, [21] encontró, usando un modelo numérico diferente, que la distancia final recorrida por los granos aumenta de manera monótona con a , acorde a los resultados experimentales y numéricos mencionados. Aunque no observa una transición en la ley de escalamiento tan evidente, sí indica que existe una dependencia para valores diferentes de la fricción entre los granos.

CAPÍTULO 3

Modelo Numérico

Existen diversos métodos numéricos para realizar simulaciones de medios granulares (veáse por ejemplo [19] para una revisión muy completa de los métodos más comunes) y cada uno de ellos tiene sus ventajas y desventajas. Ya que los medios granulares consisten en colecciones de muchas partículas individuales con tamaños que varían desde micrómetros hasta centímetros, un método adecuado para realizar simulaciones de este tipo es el Método del Elemento Discreto (MED), también conocido como Dinámica Molecular. Este método consiste en resolver de forma numérica las ecuaciones de movimiento dadas por las leyes de Newton para cada una de las partículas que conforman el medio granular. Esta técnica es una de las más empleadas en la literatura de simulaciones de medios granulares [19] y es el tema de este capítulo.

Comenzaremos exponiendo la idea general el Método del Elemento Discreto y

el algoritmo numérico empleado para integrar las ecuaciones de movimiento. En general, la dinámica de $i = 1, \dots, N$ partículas localizadas en las posiciones determinadas por los vectores \mathbf{r}_i está regida por las $3N$ ecuaciones, en general dependientes del tiempo, dadas por la Segunda Ley de Newton:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \mathbf{f}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \\ \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{J_i} \boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \quad (j = 1, \dots, N)\end{aligned}$$

en donde la fuerza \mathbf{f}_i y el torque $\boldsymbol{\sigma}_i$ actuando sobre la partícula i de masa m_i y momento de inercia J_i son funciones de las posiciones de las partículas \mathbf{r}_j , sus orientaciones angulares φ_j y las correspondientes velocidades, \mathbf{v}_j y ω_j . En sistemas bidimensionales, la orientación angular y el momento de inercia son cantidades escalares. En general, el sistema de ecuaciones acopladas no lineales no puede resolverse analíticamente y deben buscarse soluciones numéricas. Al método numérico que calcula las fuerzas y torques para integrar las ecuaciones y obtener las trayectorias de todas y cada una de las partículas en el sistema se le conoce como Dinámica Molecular o Método del Elemento Discreto (MED). A diferencia de los cálculos de Dinámica Molecular clásicos, en medios granulares las interacciones son de corto alcance y se dan solamente cuando las partículas se encuentran en contacto mecánico; por lo tanto, la fuerza \mathbf{f}_i y el torque $\boldsymbol{\sigma}_i$ están dados por la suma de todas las interacciones en pares de la i -ésima partícula con el resto de las que componen el sistema:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij}, \quad \boldsymbol{\sigma}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \boldsymbol{\tau}_{ij}.$$

Si se conocen las fuerzas \mathbf{f}_{ij} y los torques τ_{ij} entre las partículas como funciones de las coordenadas de cada partícula que interactúa, $(\mathbf{r}_i, \varphi_i)$ y $(\mathbf{r}_j, \varphi_j)$ y sus derivadas temporales, es posible incorporarlas en las ecuaciones de movimiento y resolverlas numéricamente. Las leyes de interacción entre partículas dependen del modelo de contacto; más adelante se discutirá el modelo que fue usado en este trabajo. Antes se presenta el algoritmo de integración numérica implementado.

3.0.3. Algoritmo de integración

La ecuación de movimiento para el grado de libertad traslacional de un grano de masa m_i puede escribirse, de manera general, como

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i + \alpha_i \dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i \quad (3.1)$$

El término proporcional a la velocidad del grano, $\alpha_i \dot{\mathbf{r}}_i$, llamado el término viscoso, se incluye para tomar en cuenta disipación debido al medio en el que se encuentran las partículas (vacío, aire, etc.) y proporciona una forma rápida de que el sistema alcance relajación al equilibrio. En el término del lado derecho, \mathbf{f}_i , se incluyen todas las fuerzas que actúan sobre la partícula, incluyendo las fuerzas externas (por ejemplo la gravedad cerca de la superficie terrestre, campos electromagnéticos, etc.). Dada la naturaleza del problema que estamos estudiando, la única fuerza externa considerada es la de la gravedad, $m_i \mathbf{g}$. Las contribuciones de otras interacciones que se incluyen en el término \mathbf{f}_i serán discutidas más adelante.

Para integrar numéricamente la ecuación de movimiento 3.1 y encontrar la evolución temporal de cada grano en el sistema, usamos el llamado algoritmo de Verlet [1, 2], el cual aproxima la solución de la ecuación diferencial (de segundo orden) al tiempo $t_{n+1} = (n + 1)dt$ usando un paso del tiempo no nulo, dt con la informa-

ción que se tiene del estado al tiempo anterior $t_n = ndt$, de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \left(1 - \frac{\alpha_i dt}{2m_i}\right) dt \mathbf{v}_i^n + \frac{dt^2}{2m_i} \mathbf{f}_i^n \quad (3.2)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \left(\frac{1 - \frac{\alpha_i dt}{2m_i}}{1 + \frac{\alpha_i dt}{2m_i}}\right) \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{1 + \frac{\alpha_i dt}{2m_i}} \frac{dt}{2m_i} (\mathbf{f}_i^n + \mathbf{f}_i^{n+1}) \quad (3.3)$$

en donde hemos hecho uso de la notación $X_i^n = X_i(t_n) = X_i(n \cdot dt)$ para el n -ésimo paso entero del tiempo y $\mathbf{v}_i \equiv \dot{\mathbf{r}}_i$. Nótese que los valores al tiempo $t_{n+1} = (n+1)dt$ se calculan usando la información obtenida al tiempo inmediato anterior, $t_n = ndt$, de modo que la evaluación de la fuerza al tiempo t_{n+1} es posible ya que para calcularla se requiere la información del estado del sistema al tiempo t_n : $\mathbf{f}_i^{n+1} = \mathbf{f}_i(\mathbf{r}_i^n, \mathbf{r}_j^n, \mathbf{v}_i^n, \mathbf{v}_j^n, \varphi_i^n, \varphi_j^n, \omega_i^n, \omega_j^n)$.

El algoritmo se implementa suponiendo que se conocen las condiciones del sistema al tiempo $t_n = ndt$, es decir, $\mathbf{r}_i^n, \mathbf{v}_i^n, \varphi_i^n, \omega_i^n$ y \mathbf{f}_i^n para todos los granos que lo conforman. El estado del sistema al tiempo $t_{n+1} = (n+1)dt$ se actualiza de acuerdo a los siguientes pasos:

1. Se obtiene la nueva posición, \mathbf{r}_i^{n+1} , usando la ecuación 3.2;
2. Se calcula \mathbf{f}_i^{n+1} usando la forma funcional de la fuerza:

$$\mathbf{f}_i^{n+1} = \mathbf{f}_i(\mathbf{r}_i^n, \mathbf{r}_j^n, \mathbf{v}_i^n, \mathbf{v}_j^n, \varphi_i^n, \varphi_j^n, \omega_i^n, \omega_j^n)$$

3. Se obtiene la velocidad \mathbf{v}_i^{n+1} usando la ecuación 3.3 con las fuerzas \mathbf{f}_i^n y \mathbf{f}_i^{n+1} .

Para los grados de libertad rotacionales, las ecuaciones similares a 3.2 y 3.3 con los reemplazos $\mathbf{r}_i \rightarrow \varphi_i$, $\mathbf{v}_i \rightarrow \omega_i$ y $\mathbf{f}_i \rightarrow \boldsymbol{\sigma}_i$ para cada uno de los granos del sistema.

La implementación del algoritmo de integración para cada partícula es relativamente simple, pero para poderlo utilizar es necesario conocer la forma funcional de la fuerza, f_i , que se obtiene del modelo de contacto y claramente depende de la elección de éste. A continuación se discute el modelo de contacto que se ha empleado en este trabajo.

3.0.4. Modelo de contacto

Los medios granulares son sistemas con un alto grado de complejidad, resultado de las múltiples interacciones entre todos los componentes (partículas que lo forman y alrededores), y no existe modelo teórico que describa por completo todas las características del comportamiento y dinámica para una configuración particular. Debido a esto, nos vemos obligados a construir modelos, de preferencia simples, que capturen los principales componentes de un sistema. En general, los modelos de medios granulares comúnmente usados en simulaciones con el MED suponen, como ya hemos mencionado, que cada grano puede ser representado por una partícula circular (en dos dimensiones) o esférica (en 3 dimensiones) y que las interacciones entre partículas son de corto alcance y se dan únicamente cuando las partículas están en contacto. Estas hipótesis son suficientes para construir modelos adecuados para el estudio de muchos tipos de configuraciones y se usan como base para desarrollar modelos más complejos.

El MED se ubica dentro de la categoría de los llamados *métodos de dinámica suave*, debido a que una contribución fundamental a las interacciones entre partículas se obtiene a partir de un potencial expresado por una función continua y derivable (de clase C^1) de las posiciones de los granos.

Diremos que dos granos con radios R_i y R_j respectivamente, se encuentran en con-

tacto (o en contacto mecánico) si la suma de sus radios $R_i + R_j$ excede la distancia entre sus centros de masa r_{ij} (figura 3.1). Si denotamos a la diferencia entre la suma de los radios y la distancia relativa entre los centros de masa de las partículas por ξ_{ij} , es decir si

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = R_i + R_j - r_{ij},$$

entonces la condición para que exista contacto mecánico se expresa como

$$\xi_{ij} > 0.$$

Cuando esto ocurre (es decir cuando existe un contacto mecánico), la fuerza entre ambas partículas es no nula y actúa causando el rompimiento del contacto, es decir, esta fuerza es repulsiva. La cantidad ξ_{ij} , que es una medida del desplazamiento mutuo, se conoce como *compresión*, y la magnitud de la fuerza repulsiva depende explícitamente de ésta. Esta fuerza modela el efecto físico de dos partículas que al contacto sufren una ligera deformación elástica (alrededor del punto de contacto sobre ambas superficies) causando una restitución que tiende romper el contacto mecánico. La fuerza total sobre el i -ésimo grano es la suma de las interacciones de éste con todos los demás granos en el sistema, de modo que

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij} - m_i \mathbf{g}.$$

Dada la complejidad de las interacciones, lo mejor que podemos hacer al intentar modelar medios granulares, es proporcionar una expresión para la fuerza (en términos de la compresión ξ_{ij} y otras cantidades) sencilla y que sea numéricamente tratable, es decir que pueda implementarse de manera eficiente en un esquema de simulación numérico. Para esto, es común, cuando se simulan medios granu-

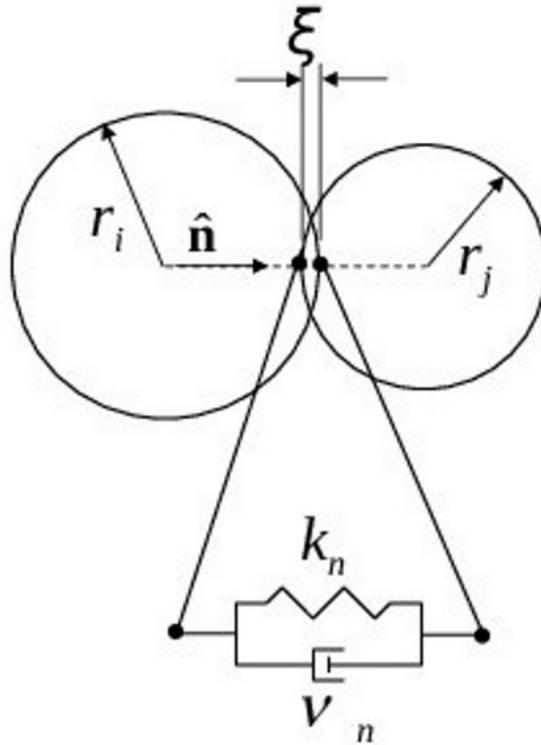


Figura 3.1: Esquema del contacto mecánico.

lares, separar las fuerzas de contacto que contribuyen a \mathbf{f}_i en una componente normal, en la dirección que une los centros de masa de los granos en contacto, y una componente tangencial, perpendicular a la dirección normal (figura 3.1). De esta manera, la fuerza que actúa entre partículas que se encuentran en contacto puede expresarse como (ignorando el término debido a la aceleración de la gravedad en la superficie de la Tierra):

$$\mathbf{f}_{ij} = \begin{cases} \mathbf{f}_{ij}^{\hat{n}} + \mathbf{f}_{ij}^{\hat{t}} & \text{si } \zeta_{ij} > 0 \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases}$$

En la expresión anterior, $\mathbf{f}_{ij}^{\hat{n}}$ es la componente de la fuerza sobre el grano i debido a su interacción con el grano j en la dirección normal \hat{n} , y $\mathbf{f}_{ij}^{\hat{t}}$ es la componente de la misma en la dirección tangencial \hat{t} . Cuando existe contacto entre granos, una

fuerza en la dirección normal causa un cambio en el grado de libertad traslacional, mientras que una fuerza tangencial provoca un cambio en el movimiento rotacional (y posiblemente en el traslacional). Las componentes normal y tangencial de la fuerza pueden entonces escribirse como

$$\mathbf{f}_{ij}^{\hat{n}} = f_{ij}^{\hat{n}} \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad \mathbf{f}_{ij}^{\hat{t}} = f_{ij}^{\hat{t}} \hat{\mathbf{t}}_{ij},$$

con los vectores unitarios en dos dimensiones

$$\hat{\mathbf{n}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad \hat{\mathbf{t}}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij},$$

y las magnitudes

$$f_{ij}^{\hat{n}} = f_{ij}^{\hat{n}}(\zeta_{ij}, \dot{\zeta}_{ij}) \tag{3.4}$$

$$f_{ij}^{\hat{t}} = f_{ij}^{\hat{t}}(\zeta_{ij}, \dot{\zeta}_{ij}) \tag{3.5}$$

son funciones que dependen, entre otras cantidades, explícitamente de la compresión. Estas expresiones son de vital importancia para el método de simulación, ya que de su elección dependerá que los resultados obtenidos sean conforme a las observaciones y resultados experimentales. En lo que resta de éste capítulo presentaremos las formas explícitas para las expresiones funcionales de las magnitudes de la fuerza normal y tangencial 3.4, 3.5 que se usaron en este trabajo.

Fuerzas Normales

En la dirección normal, definida por el vector unitario (independientemente de si existe contacto o no)

$$\hat{\mathbf{n}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

la fuerza que actúa entre partículas en contacto mecánico consiste en dos partes: una fuerza elástica de restitución, determinada por la compresión, y un término viscoso, proporcional a la velocidad relativa de los granos, que disipa energía cinética en el grado de libertad traslacional, modelando así colisiones inelásticas. Escribimos la magnitud de la fuerza en la dirección normal como la suma de dos términos:

$$f_{ij}^{\hat{n}} = f_{ij,el}^{\hat{n}} + f_{ij,vis}^{\hat{n}} \quad (3.6)$$

El término elástico, $f_{ij,el}^{\hat{n}} = f_{ij,el}^{\hat{n}}(\xi_{ij})$, es una fuerza conservativa derivable de un potencial de interacción ϕ_{ij} , de modo que

$$f_{ij,el}^{\hat{n}}(\xi_{ij}) = -\nabla_i \phi_{ij},$$

donde $\phi_{ij} = \phi_{ij}(\xi_{ij})$ es una función explícita de la compresión y está dada por la suma de las interacciones del grano i con los demás granos en el sistema:

$$\phi_{ij} = \sum_{i \neq j} u_{ij}(\xi_{ij}).$$

siendo $u_{ij}(\xi_{ij})$ el potencial de interacción del grano i con el grano j . En este trabajo se ha elegido para este potencial de interacción la siguiente forma explícita:

$$u_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{\xi_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{\xi_{ij}} \right)^6 \right) + \epsilon_{ij}. \quad (3.7)$$

Este potencial es un legado de los primeros estudios de Dinámica Molecular [1] y a pesar de que fue originalmente introducido para estudios de gases nobles y fluídos, ha sido utilizado en múltiples trabajos numéricos de medios granulares [11, 14] con éxito obteniéndose resultados acordes a las observaciones experimentales.

El potencial dado por la ecuación 3.7 tiene dos parámetros que determinan la interacción: ϵ_{ij} es la energía potencial entre dos granos con una compresión mutua ξ_{ij} igual a σ_{ij} , es decir $u_{ij}(\sigma_{ij}) = \epsilon_{ij}$. Recordemos que una de las hipótesis para un modelo de interacciones de medios granulares es que éstos únicamente interactúan cuando existe contacto mecánico entre pares de granos. Si las superficies de los granos no se encuentran en contacto mecánico, entonces la fuerza entre ellos es nula. Con este modelo de interacción para la fuerza elástica, si la compresión mutua es igual a $\xi_{ij}^c = 2^{1/6}\sigma_{ij}$, entonces la interacción es nula, es decir, no hay contacto mecánico. En términos mecánicos, la fuerza normal no actúa de manera inmediata cuando la compresión mutua es $\xi_{ij} > 0$, si no que, en este modelo, existe una región alrededor de la superficie de los granos sobre la que no existe contacto mecánico. La magnitud de esta región puede controlarse por medio del parámetro σ_{ij} del potencial de interacción 3.7 y puede verse como una propiedad de “suavidad” de la superficie de los granos que modela la deformación sobre la superficie de cada grano. Si los granos son muy “suaves” ($\sigma_{ij} \gg 1$), entonces se deforman mucho al contacto, si son menos “suaves” ($\sigma_{ij} \ll 1$), entonces son menos deformables y más rígidos.

Cuando la condición de contacto mecánico, determinada por el potencial de in-

teracción 3.7, se satisface entre dos granos, la magnitud de la fuerza elástica en la dirección normal, $f_{ij,el}^{\hat{n}}$, es

$$f_{ij,el}^{\hat{n}}(\xi_{ij}) = -\nabla_i \phi_{ij} = -\sum_{i \neq j} 4\epsilon_{ij} \left(\frac{6\sigma_{ij}^6}{\xi_{ij}^7} - \frac{12\sigma_{ij}^{12}}{r\xi_{ij}^{13}} \right).$$

Nótese que esta fuerza elástica es una fuerza no lineal. Su magnitud depende de la compresión mutua y de los parámetros σ_{ij} y ϵ_{ij} , el primero una longitud característica de las partículas y el segundo la intensidad de la interacción entre los granos.

El segundo término en la ecuación 3.6 de la magnitud de la fuerza en la dirección normal, $f_{ij,vis}^{\hat{n}}$, corresponde a un término viscoso de interacción que se elige simplemente proporcional a la velocidad relativa entre los granos:

$$f_{ij,vis}^{\hat{n}} = \beta^{\hat{n}} \dot{\xi}_{ij},$$

donde $\beta^{\hat{n}}$ es el parámetro que controla la magnitud de la viscosidad en la dirección normal. Este término viscoso se incluye para modelar el efecto físico de la disipación de energía en el grado traslacional en cada colisión entre granos. El valor del parámetro $\beta^{\hat{n}}$ dependerá de las características del sistema que desea modelarse.

Para concluir esta sección, en el modelo que se usa en este trabajo, la fuerza de interacción en la dirección normal sobre un grano está dada por:

$$f_{ij}^{\hat{n}} = -\sum_{i \neq j} 4\epsilon_{ij} \left(\frac{6\sigma_{ij}^6}{\xi_{ij}^7} - \frac{12\sigma_{ij}^{12}}{r\xi_{ij}^{13}} \right) + \beta^{\hat{n}} \dot{\xi}_{ij}. \quad (3.8)$$

El primer término es una fuerza elástica no lineal que actúa de manera repulsiva únicamente cuando existe contacto mecánico (determinado por la condición

$0 < \xi_{ij} < 2^{1/6}\sigma_{ij}$), mientras que el segundo término es una fuerza de arrastre proporcional a la velocidad relativa de los granos. Los parámetros de esta componente de la fuerza son la intensidad de la interacción ϵ_{ij} , la longitud característica σ_{ij} y la intensidad de la viscosidad, $\beta_{ij}^{\hat{n}}$. La elección de los valores de estos parámetros usados en este trabajo se discutirán más adelante en el capítulo.

A continuación presentamos las fuerzas que actúan sobre los granos en la dirección tangencial cuando existe contacto mecánico. Estas fuerzas son causadas por la fricción entre las superficies y causan un cambio en el grado de libertad rotacional de los granos que interactúan y, como veremos, posiblemente, sobre los grados traslacionales.

Fuerzas Tangenciales

Las fuerzas tangenciales actúan en dirección de un plano tangencial al punto de contacto de la superficie de los granos. En dos dimensiones este plano se localiza en dirección perpendicular a la dirección normal, de acuerdo a los vectores unitarios arriba mencionados. En tres dimensiones este plano no está definido de manera inequívoca debido a la dirección espacial adicional que no existe en el caso bidimensional. Un problema que se presenta al intentar modelar las fuerzas tangenciales es que la interacción no se da sobre un punto únicamente, sino sobre toda una región alrededor de la superficie de contacto. De esta manera, el plano de contacto ni siquiera está bien definido. Por razones como ésta, los modelos de fuerzas tangenciales pueden ser sumamente complicados, además que los efectos causados por estas fuerzas no son sencillos ni están bien entendidos. En nuestro modelo dejaremos a un lado estas complicaciones y trataremos las fuerzas tangenciales como si ocurrieran sobre un plano en la dirección perpendicular a la

dirección normal con un modelo sencillo que captura algunas de las propiedades básicas observadas en flujos granulares.

El modelo de fuerza tangencial que se ha empleado en este trabajo corresponde a un término dependiente del desplazamiento relativo acumulado en la dirección tangencial. Al igual que las fuerzas en la dirección normal, la fuerza tangencial solamente actúa cuando existe contacto mecánico entre dos granos. En ese momento, el desplazamiento total en la dirección tangencial depende de la velocidad relativa (tangencial) y el tiempo que dura el contacto: $\tilde{\zeta}_{ij}^{\hat{t}} = \dot{\zeta}_{ij}^{\hat{t}} \cdot \tau_c$. La velocidad relativa tangencial incluye la velocidad relativa de rotación de los granos, $\omega_{ij} = R_i \cdot \varphi_i - R_j \cdot \varphi_j$

La fuerza elástica tangencial sobre el grano i debida a la interacción con el grano j es la acumulación de este desplazamiento tangencial multiplicado por una constante elástica κ_t . Esta fuerza, sin embargo, está constreñida por la condición de Coulomb: si $\kappa_t \tilde{\zeta}_{ij}^{\hat{t}} > \mu |f_{ij}^{\hat{n}}|$, es decir si la fuerza elástica tangencial es mayor que la magnitud de la fuerza en la dirección normal amplificada por el coeficiente de fricción entre los granos, entonces la fuerza tangencial es el mínimo entre ellas:

$$f_{ij,el}^{\hat{t}} = \min(\kappa_t \tilde{\zeta}_{ij}^{\hat{t}}, \mu |f_{ij}^{\hat{n}}|) \quad (3.9)$$

Esta fuerza en la dirección tangencial modifica el grado de libertad rotacional de los granos produciendo un torque sobre ellos. En este modelo no se considera, pero podría ocurrir que si la magnitud de la fuerza tangencial es muy grande, se observe un proceso conocido como “stick and slip” en el cual el grado rotacional no se modifica sino que los granos adquieren un momento extra en la dirección tangencial que modifica el estado traslacional. También podría ocurrir que uno de los granos solamente se deslice sobre la superficie del otro sin cambios al grado

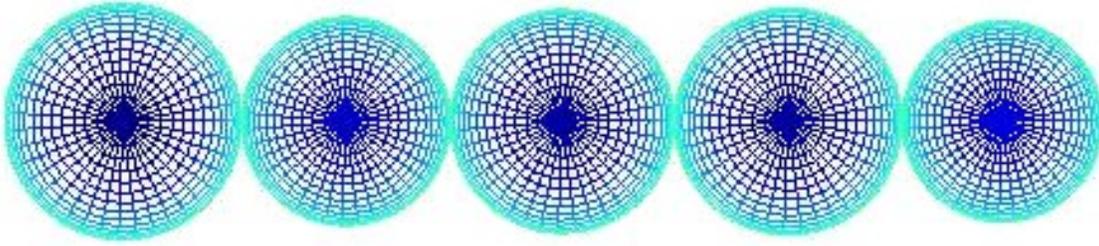


Figura 3.2: Esquema de la composición de granos alargados a partir de granos circulares.

rotacional. Sin embargo el modelo que aquí presentamos no incluye estas posibilidades, que solamente lo hacen más complejo tanto analíticamente como numéricamente.

Los parámetros que controlan la fuerza en la dirección tangencial son la constante elástica κ_t y el coeficiente de fricción entre los granos, μ . La elección de los valores de estos parámetros se discutirán más adelante.

En este trabajo estamos interesados en estudiar el colapso de columnas usando granos alargados. Los granos alargados están compuestos por granos circulares constreñidos por medio de fuerzas a moverse como un objeto rígido en una dirección. En otras palabras, los N_l granos circulares que forman cada grano alargado se mantienen sobre una misma línea (figura 3.2).

De este modo, es posible simular granos que aproximan barras con una razón de ancho/largo deseadas. A continuación daremos una breve descripción del método numérico implementado para constreñir los granos a una geometría lineal.

Fuerzas de constricción para partículas no esféricas.

Para modelar los granos alargados, utilizamos el método desarrollado en [17] que esbozaremos a continuación. El algoritmo consiste en un cálculo exacto de las fuerzas necesarias para mantener a dos o más partículas (circulares) constreñidas

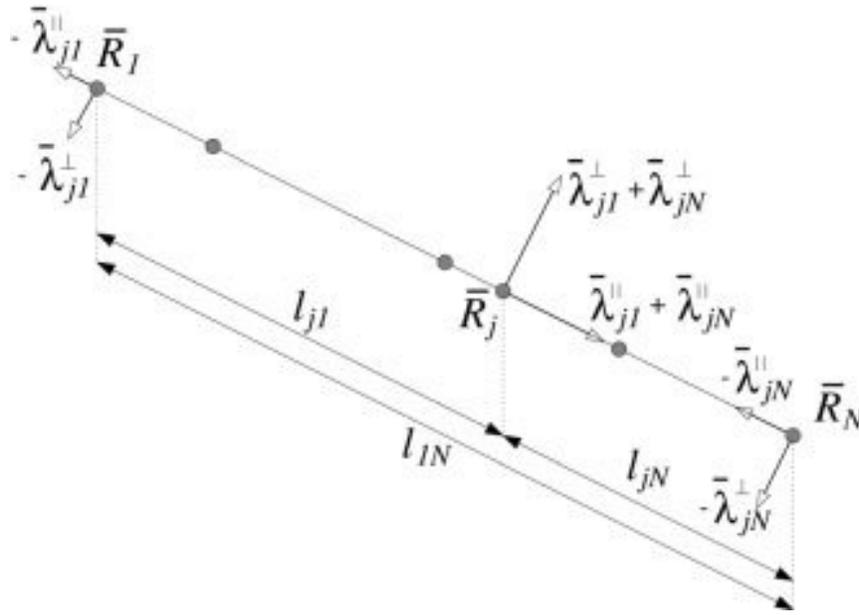


Figura 3.3: Esquema de la restricción de N_l partículas sobre una línea.

a moverse sobre una línea mientras evolucionan de acuerdo a otras fuerzas de interacción. De este modo es posible modelar granos alargados de manera aproximada, fijando un número N_l de granos individuales a una geometría lineal, como se muestra en la figura 3.2.

Para tal efecto, se evalúan numéricamente los multiplicadores de Lagrange necesarios para mantener a las partículas sobre una línea (figura 3.3), y haciendo uso de los principios de conservación y de la ambigüedad en la distribución de las fuerzas en la dirección longitudinal del ensamble de partículas, es posible obtener los multiplicadores en dicha dirección como solución de un polinomio de segundo orden. Los detalles y la implementación de este método en el algoritmo de Verlet, discutido anteriormente, se encuentran en [17].

Parámetros del modelo

Una vez descritas las fuerzas que actúan sobre los granos en el modelo que usamos en este trabajo, es necesario elegir los parámetros que usaremos en las simulaciones. Junto a los parámetros que ya hemos mencionado que determinan las fuerzas normales y tangenciales, debemos de tomar en cuenta los parámetros que caracterizan las propiedades de cada grano. Estos son la densidad y el tamaño. Recordando que cada grano se modela como si fuera un disco (esfera en 3 dimensiones), el radio se determina a partir del diámetro. La masa y el momento de inercia (que aparecen en las ecuaciones de movimiento) de cada partícula se calculan como si fueran esferas (con las implicaciones que esto produce): dado el diámetro de cada grano, elegido aleatoriamente de una distribución normal alrededor de un diámetro promedio y una desviación dada, se obtiene el radio y el volumen del grano (como si fuera una esfera). Con esto podemos obtener el momento de inercia y dada la densidad de cada grano, el correspondiente valor de su masa. Los otros parámetros que deben especificarse para la simulación se encuentran en la tabla 3.1, en donde también se indican los valores numéricos usados en todas las simulaciones. Algunos valores, como por ejemplo $\epsilon_i = 1.0$ para la intensidad de la interacción en la dirección normal, han sido elegidos puramente por una conveniencia numérica. Las unidades están determinadas por el valor de la gravedad que se ha elegido como $g = 9.81m/s^2$ y como unidad de distancia usaremos el diámetro promedio del grano d_i (indicado en la tabla 3.1), de modo que todas las distancias se miden con respecto a esta unidad. De este modo una columna con radio inicial de $R_0 = 60.0$ equivale a una columna de radio $\mathbf{R}_0 = \frac{60}{d_i}$.

Los últimos dos parámetros que aparecen en la tabla 3.1 merecen atención, en particular el coeficiente (de restitución) elástico normal, κ_n , que no se ha mencionado en el texto. El coeficiente elástico normal se obtiene del desarrollo en serie de Tay-

g	Constante de gravedad	$9.81 [m/s^2]$
N_l	Razón ancho/largo de granos alargados	1, 3, 5
ρ_i	Densidad del grano	8.0
d_i	Diámetro promedio del grano	0.6 ± 0.1
m_i	Masa de granos circulares	$m_i = \frac{4\pi r_i^3 \rho}{3}$
J_i	Momento de inercia del grano	$J_i = \frac{2m_i r_i^2}{5}$
α_i	Viscosidad del medio	1.0
ϵ_i	Intensidad de interacción elástica normal	1.0
σ_i	Traslapamiento normal	0.1
$\beta^{\hat{n}}$	Viscosidad normal	0.5
μ	Coefficiente de fricción entre granos	0.5
κ_n	Coefficiente elástico normal	
κ_t	Coefficiente elástico tangencial	

Tabla 3.1: Valores de los parámetros del modelo empleados en las simulaciones.

lor del potencial de interacción 3.7 alrededor de \tilde{c}_{ij}^c . El coeficiente del primer término de la serie que no se anula es la aproximación lineal de la interacción elástica y lo denotamos por κ_n . Su forma explícita es:

$$\kappa_n = \frac{6 \cdot 2^{2/3} \epsilon_{ij}}{\sigma_{ij}^2}$$

El valor del coeficiente elástico tangencial κ_t , se elige idéntico al valor de κ_n .

Con estos valores de los parámetros del modelo presentado en este capítulo llevamos a cabo una serie de simulaciones del colapso de columnas granulares formadas por granos alargados con $N_l = 1,5$. Los resultados de estas simulaciones son el contenido del siguiente capítulo.

CAPÍTULO 4

Resultados

Con los métodos descritos en el capítulo anterior, se han realizado simulaciones del colapso de columnas granulares en dos dimensiones, con granos formados por partículas circulares (discos), los cuales se identifican por $N_l = 1$ y con granos alargados, identificados por $N_l = 5$. En todos los casos, el diámetro de cada partícula individual se elige al azar de una distribución normal centrada en 0.6 y con una desviación de 0.1 (ver tabla 3.1), es decir, las partículas que forman los granos tienen un diámetro aleatorio entre 0.5 y 0.7. Con esta forma de elegir las partículas se obtiene una polidispersión suficiente para obtener un empacamiento más aleatorio y evitar un estado de cristalización.

El sistema se prepara colocando $N = 2000$ granos del tipo N_l en posiciones aleatorias dentro de una región determinada por una separación que corresponde al ancho de la columna (figura 4.1). El radio de la columna, R_0 , es entonces la mi-

RESULTADOS

tad de esta separación. Para este estudio hemos variado R_0 , entre $[16.6, 166.6]$ en unidades de $d_i = 0.6$ que como se muestra en la tabla 4.1, corresponden a valores numéricos de R_0 en el intervalo $[10, 100]$.

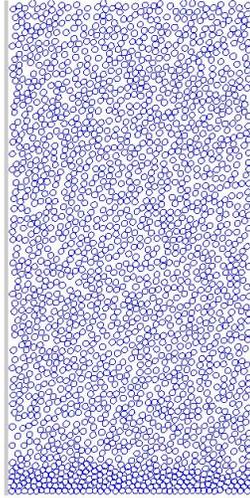


Figura 4.1: Preparación típica de una columna. $R_0 = 35d_i$, $N_l = 1$

Una vez colocados los granos dentro de la región que determina la columna, su dinámica evoluciona de acuerdo a las interacciones descritas en el capítulo anterior hasta que se depositan completamente formando la columna. Cuando se relajan al equilibrio se obtiene la posición horizontal máxima, que corresponde a la altura inicial de la columna H_0 , como se muestra en la figura 4.2. Con esta técnica de preparación de las columnas hemos obtenido los valores del parámetro $a = H_0/R_0$ que se muestran también en la tabla 4.1.

Cuando se tiene lista la columna, al tiempo $t = 0$ iniciamos la simulación del colapso removiendo instantáneamente las interacciones con las paredes laterales, de manera que los granos empiezan a fluir hacia ambos lados en la dirección horizontal convirtiendo la energía potencial en cinética y causando que la columna se

R_0	$a = H_0/R_0$	
	N_l	
	$l = 1$	$l = 5$
20.0	3.33	8.28
25.0	2.10	5.41
30.0	1.47	-
35.0	1.10	-
40.0	0.85	2.11
45.0	0.67	-
50.0	0.55	1.37
55.0	0.47	-
60.0	0.42	0.97
65.0	0.36	-
70.0	0.31	0.77
75.0	0.30	-
80.0	0.27	0.57
85.0	-	0.52
90.0	-	0.49
100.0	-	0.40

Tabla 4.1: Propiedades geométricas de las columnas simuladas para los casos N_l estudiados. En el caso $l = 1$ hay un total de $N = 2000$ partículas, mientras que en el caso $l = 5$ hay un total de $N = 5 \times 2000 = 10^3$ partículas.

RESULTADOS



Figura 4.2: Ejemplo típico de un estado inicial.

colapso. La figura 4.3 muestra la instantánea de una simulación típica luego que se han quitado las interacciones con las paredes y los granos han comenzado a moverse. La simulación se detiene cuando la diferencia en la energía cinética total del sistema entre dos tiempos consecutivos de la integración, t_j y t_{j-1} satisface

$$\frac{|E_k^{j-1} - E_k^j|}{E_k^{j-1}} < 10^{-5}.$$

Cuando esto ocurre, se determina la distancia final recorrida por el depósito, R_∞ , con el valor de la coordenada horizontal de la posición del grano que se encuentra más alejado del centro de la columna.

Antes de continuar, es importante aclarar un punto sobre cómo se determina el estado final del colapso. En el caso ideal, la energía cinética de las partículas se ha disipado por completo resultando en un estado estático (todos los granos en reposo); sin embargo, debido a consideraciones numéricas, alcanzar un estado estático es prácticamente imposible. Es por eso que imponemos las condición an-

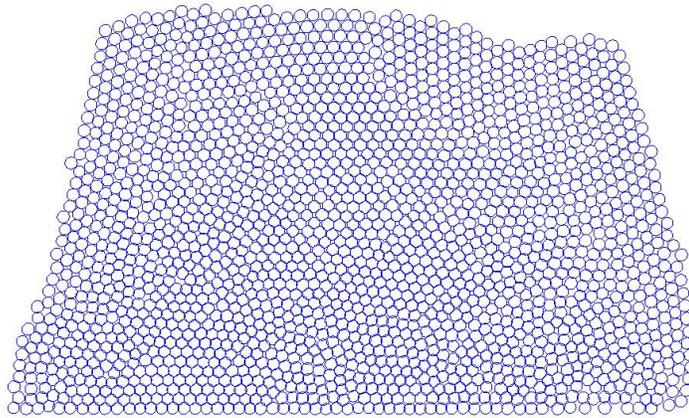


Figura 4.3: Inicio del colapso en una simulación típica con granos circulares.

terior en la energía cinética.

De los datos mostrados en la tabla 4.1 se puede determinar una primera diferencia entre las columnas formadas por granos simples y granos alargados. Si se observa el valor del parámetro a para los mismos valores del radio inicial de la columna, puede verse una diferencia marcada entre ellos. Por ejemplo, para $R_0 = 20$, el parámetro a tiene un valor de 3.33 para una columna hecha con granos simples, mientras que si la columna está formada por granos alargados con $N_l = 5$, el valor de a es de 8.28, ¡casi 3 veces más que si la columna fuera hecha de granos simples! Esta marcada diferencia es general para todos los valores del radio inicial de las columnas que se han estudiado. De la definición de a , es posible concluir a partir de esta observación que las columnas formadas por granos alargados son, inicialmente, más altas que las columnas formadas por granos simples, aunque hay que tener en cuenta que en el caso de columnas con granos alargados las simulaciones se llevan a cabo con un número mayor de partículas que en el caso de columnas con granos circulares. Una observación pertinente es que los granos alargados,

por su geometría ocupan una mayor región y su fracción de empacamiento es mucho menor y también podría influir en que las columnas formadas por granos alargados tienden a ser más altas.

En lo que resta del capítulo presentaremos los resultados para cada uno de los casos de N_l estudiados haciendo la comparación entre los casos $N_l = 1$ y $N_l = 5$ con el fin de determinar y cuantificar las diferencias observables en los colapsos de columnas granulares formadas por partículas simples y por partículas alargadas.

4.1. Resultados para granos con $N_l = 1$

Las propiedades geométricas mostradas en la tabla 4.1 para $N_l = 1$ se obtuvieron como se describió en la sección anterior con un total de $N_{tot} = 2000$ granos en cada simulación. Los resultados de las distancias finales recorridas por los depósitos se muestran en la tabla 4.2. Estos resultados se muestran gráficamente en la figura 4.4 en donde también se muestran los resultados publicados en [21] y un ajuste por mínimos cuadrados de donde se obtiene que los valores siguen la ley de potencias $\sim a^{0.57 \pm 0.02}$. Al comparar la dependencia de la distancia final recorrida en la dirección horizontal con el parámetro a entre los resultados de ambas simulaciones, se encontró una buena concordancia que sirve para establecer la validez del modelo empleado. Para propósitos de este trabajo, esta similitud es suficiente; sin embargo, queda pendiente para el futuro establecer este parecido de manera formal comparando estadísticamente los resultados de ambas simulaciones. Más adelante se comentarán las posibles causas de esta discrepancia.

El comportamiento general observado es que la distancia final recorrida por la columna tiene un crecimiento monótonico con el parámetro a [21], lo cual también concuerda con las observaciones experimentales y numéricas realizadas por [3, 9,

a	R_∞
0.27	1.97
0.30	2.10
0.31	2.27
0.36	2.37
0.42	2.49
0.47	2.70
0.55	2.99
0.67	3.31
0.85	3.84
1.10	4.40
1.47	5.23
2.10	6.45
3.33	8.38

Tabla 4.2: Valores de a y de la distancia final recorrida en la dirección horizontal para $N_l = 1$ ($N_{tot} = 2000$ granos).

10, 12, 13, 15, 16, 18]. Así mismo, el flujo que se observa durante el colapso en las simulaciones es similar a los que se describen en los experimentos citados para un intervalo amplio de valores de a , se observa un plano de deslizamiento al inicio del colapso con un ángulo definido con respecto a la base horizontal de la columna que, se sospecha, está relacionado con la fricción efectiva del sistema.

Para valores suficientemente grandes de a , este plano de deslizamiento deja de estar bien definido y el colapso ocurre con otros mecanismos, incluidos el de caída libre [16]. En nuestras simulaciones, para valores de $a < a_s \sim 0.42$, solamente los granos que se encuentran en las orillas de la columna participan del flujo del colapso mientras que los granos que se encuentran en la región central tienen un desplazamiento horizontal despreciable durante el colapso.

Dada la existencia de este plano bien definido, sólo los granos que se encuentran por encima de él participan en el colapso, mientras que los que se encuentran por debajo tienen un desplazamiento horizontal casi nulo. Conforme el ángulo del

RESULTADOS

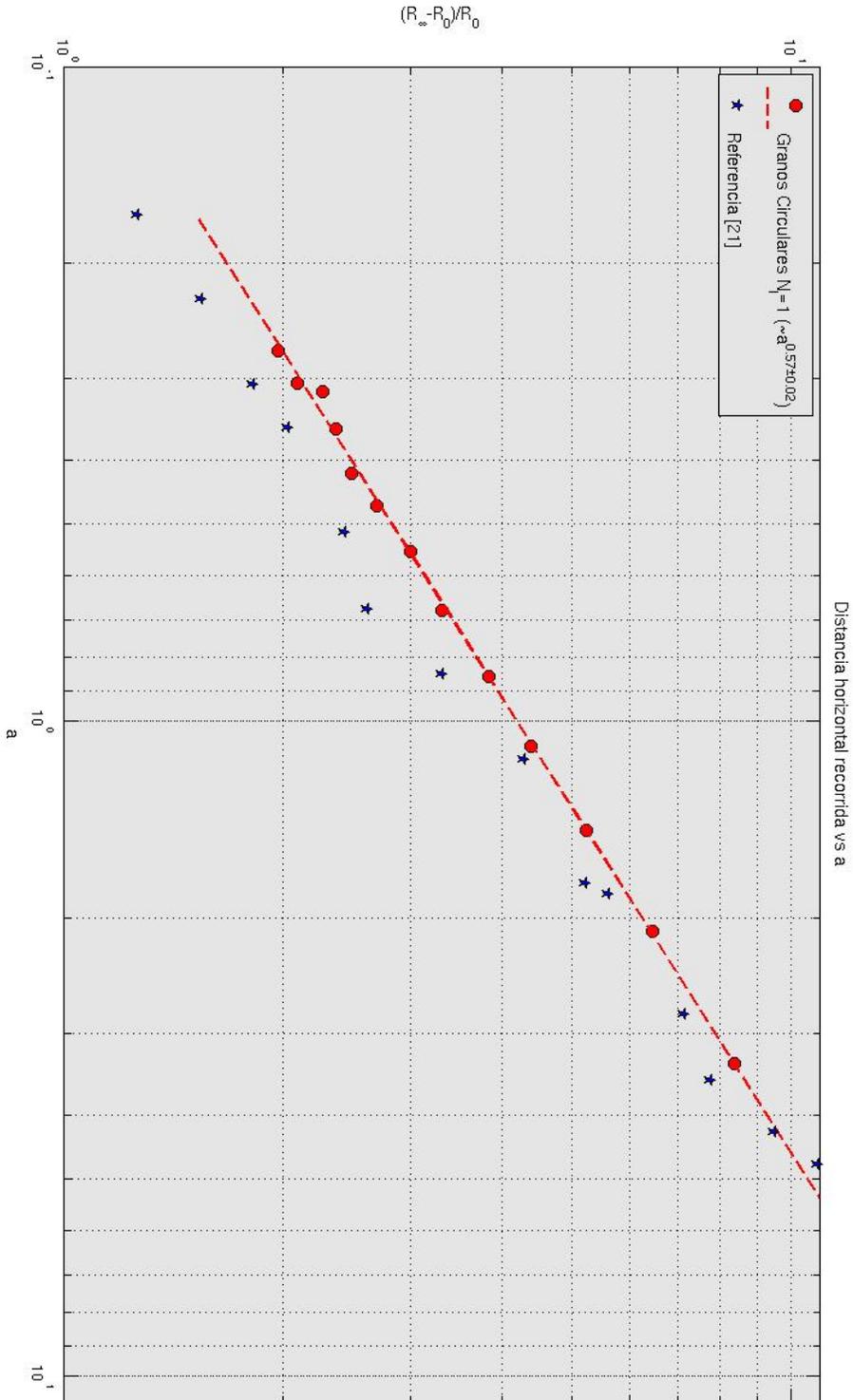


Figura 4.4: Distancia final recorrida en la dirección horizontal como función del parámetro a para granos circulares.

plano aumenta, la región geométrica que ocupan los granos inmóviles cambia de un semicono a un cono (cuando los planos de ambos extremos se intersectan) cuya altura disminuye. Estas observaciones son muy similares a las reportadas en [16].

Para valores mayores de a , cuando ya no se pueden definir claramente los planos de desplazamiento, el colapso es distinto. En estos casos todos los granos participan en el flujo del colapso de alguna forma o de otra; en general, los granos pueden desplazarse en direcciones verticales y horizontales mientras ocurre el colapso. El estudio detallado del proceso del colapso no es el objetivo de este trabajo, pero, nuevamente, las observaciones son similares a las reportadas en [16].

En los dos conjuntos de datos mostrados en la figura 4.4 puede observarse, como ya se comentó, un crecimiento monótono de la distancia final recorrida con el parámetro a . Las diferencias entre ambas simulaciones pueden ser por varios factores, entre ellos el modelo numérico empleado, los valores de los parámetros usados, etc. En particular, el valor del parámetro de fricción que se ha usado en este trabajo ($\mu = 0.5$) difiere con el de [21] donde se empleó un valor de $\mu = 0.57$. La discrepancia entre estos valores de la fricción refuerza la conclusión de [21] en cuanto a que existe una diferencia, aunque pequeña, para valores desiguales de la fricción (resultado que parece no coincidir con las conclusiones experimentales) en el colapso de columnas granulares ([21]). De la figura 4.4, podría decirse que para columnas con una mayor fricción, se espera que la distancia horizontal recorrida por el material sea menor.

La figura 4.5 muestra los perfiles de las columnas durante el colapso. En negro se muestra una aproximación al estado inicial de la columna (el ruido se debe al algoritmo usado para obtener los perfiles) y el estado final del depósito al término del colapso. Es importante notar las distintas escalas, en particular en la dirección vertical. En los perfiles puede observarse la estructura cónica aproximada que se

RESULTADOS

ha discutido para algunos valores de a . Estos perfiles nos ayudan a visualizar el proceso del colapso en sus distintas etapas y compararlos directamente para distintos valores del parámetro a .

De las simulaciones realizadas en este trabajo no es posible determinar si existe un valor crítico de a para el cual la ley de escalamiento sea diferente, como reportan los experimentos. En las simulaciones aquí presentadas, solamente encontramos un valor para el exponente de la distancia final recorrida como función de a , de $p \sim 0.57 \pm 0.02$. Comparando este exponente con el valor de 0.65 reportado por [3] para canales estrechos (colapso cuasibidimensional) o con el valor del $2/3$ reportado por [9] para un sistema plano, nuestras simulaciones capturan los detalles generales del proceso de manera satisfactoria. Sin embargo, la existencia de distintas leyes de escalamiento no es el objetivo; este tema se tratará en investigaciones futuras.

.

RESULTADOS PARA GRANOS CON $N_L = 1$

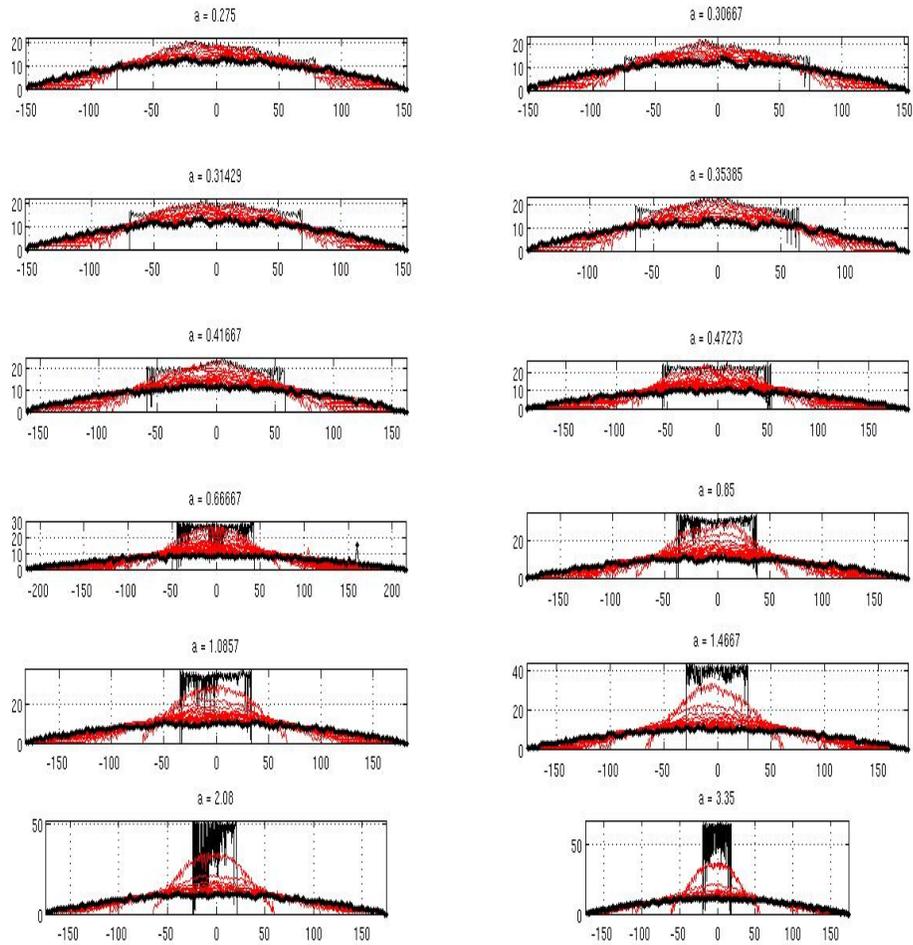


Figura 4.5: Figura que muestra la curvatura sobre la superficie en el perfil del colapso de columnas con $N_l = 1$.

4.2. Resultados para granos con $N_l = 5$

Los valores de R_0 y a que se presentan en la tabla 4.1 para $N_l = 5$ se obtuvieron de simulaciones usando $N = 2000$ granos, cada uno de ellos compuesto por $N_l = 5$ granos individuales, es decir un total de $N = 10000$ granos por cada simulación. Todos los demás parámetros del modelo son los mismos que los usados en las simulaciones con las que se obtuvieron los resultados presentados en el capítulo anterior y que se muestran en la tabla 3.1.

El proceso del colapso de columnas formadas por granos alargados ocurre de forma similar al de columnas hechas de granos circulares: existe un plano de deslizamiento sobre el cual los granos comienzan a colapsarse; sin embargo, a diferencia del caso de granos circulares, las avalanchas ocurren de otra manera. En el caso circular y para valores pequeños de a , las avalanchas se dan sobre la superficie del plano de desplazamiento, mientras que en el caso de granos alargados, las avalanchas son más “masivas”, es decir, involucran una mayor cantidad de granos y no hay un plano bien definido. Así mismo, el perfil del colapso no forma una geometría del tipo cónica (figura 4.5), sino que se observa una ligera curvatura que da al colapso un perfil circular (figuras 4.6 y 4.7), terminando con un perfil que asemeja una geometría cónica; es decir, durante el colapso de granos alargados, ocurre una transición en la columna antes de generarse una geometría cónica, lo cual no se observa en el caso de granos circulares. También, el depósito final no es tan disperso como en el caso de granos circulares (figura 4.5).

Para columnas muy altas (y más delgadas), el colapso tampoco ocurre igual que en el caso de granos circulares. En ambos casos el primer mecanismo del colapso es el de caída libre; sin embargo, mientras que para los granos circulares puede observarse que al principio del colapso, durante la caída se conserva la forma

RESULTADOS PARA GRANOS CON $N_L = 5$

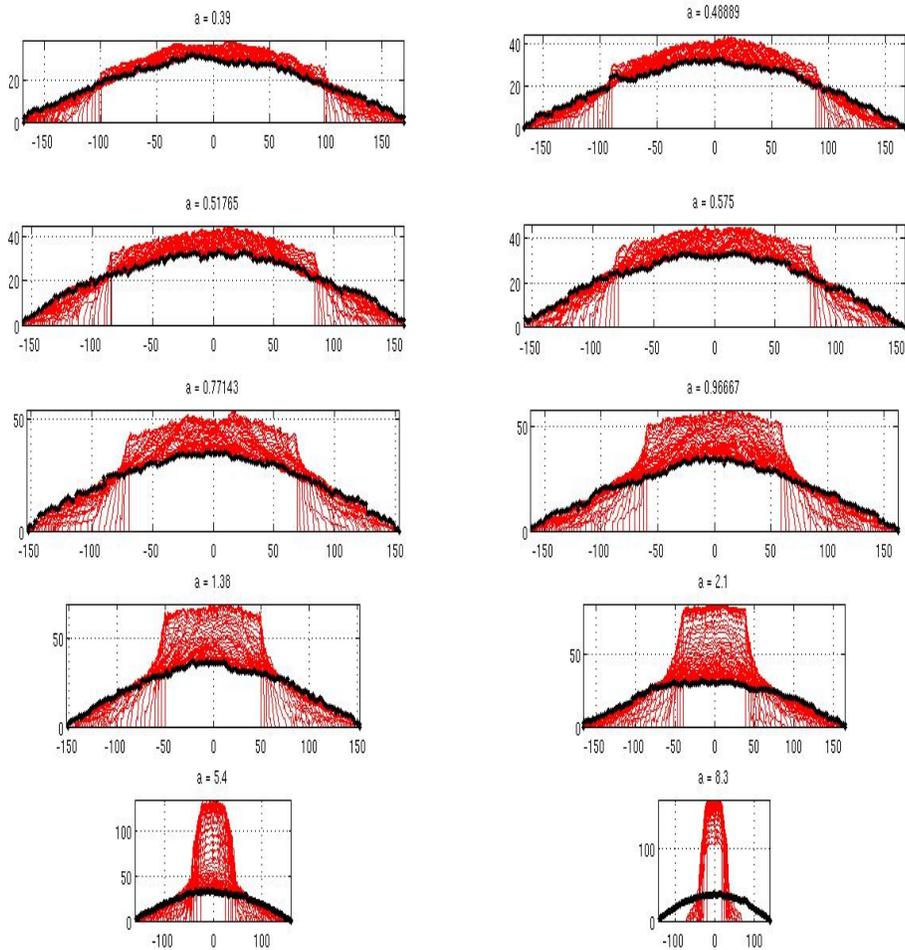


Figura 4.6: Figura que muestra la curvatura sobre la superficie en el perfil del colapso de una columna con $N_l = 5$.

RESULTADOS

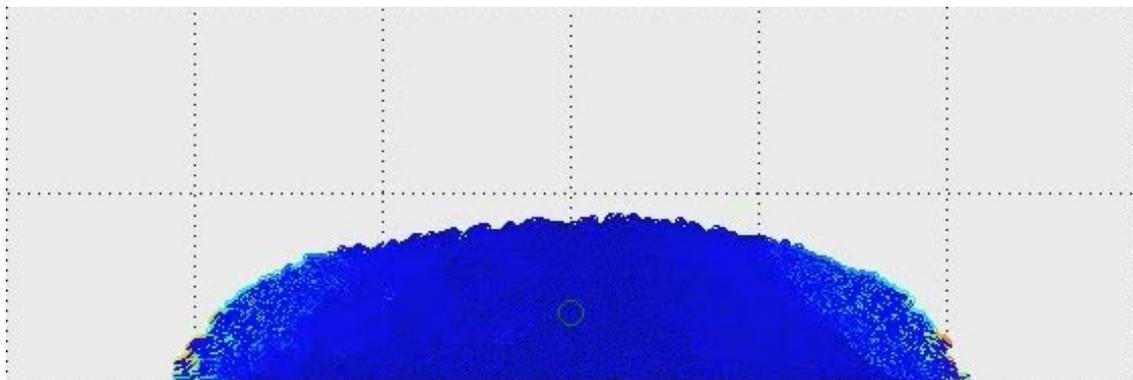


Figura 4.7: Figura que muestra la curvatura sobre la superficie del depósito en el perfil del colapso de columnas con $N_l = 5$.

de la columna hasta que los granos colisionan entre ellos cuando están cerca de la superficie horizontal, en el caso de granos alargados, como consecuencia de su geometría, se desprenden de la columna casi inmediatamente después de que ésta empieza a colapsarse (figura 4.8), perdiéndose la estructura geométrica de la columna.

Cuando los granos llegan a la superficie horizontal, comienzan a apilarse de manera regular formando una estructura cónica sobre la que se dan las avalanchas. En este caso, el perfil sobre la superficie conserva la forma cónica y no se observa un perfil curvo como en el caso de a pequeño. Para columnas altas y delgadas, la distancia final que recorren los granos es mayor; sin embargo, el depósito tampoco alcanza una dispersión final tan extensa como en el caso de granos circulares, sino que mantiene una estructura (figura 4.7).

Para valores pequeños de a no se observa un plano de deslizamiento tan bien definido y el ángulo con respecto a la horizontal de dicho plano es mucho menor que en el caso circular. El colapso también se inicia en las orillas de la columna pero con un número mayor de granos participando en el flujo, el cual comienza a ocurrir con granos que se encuentran dentro de la columna, desde la base.

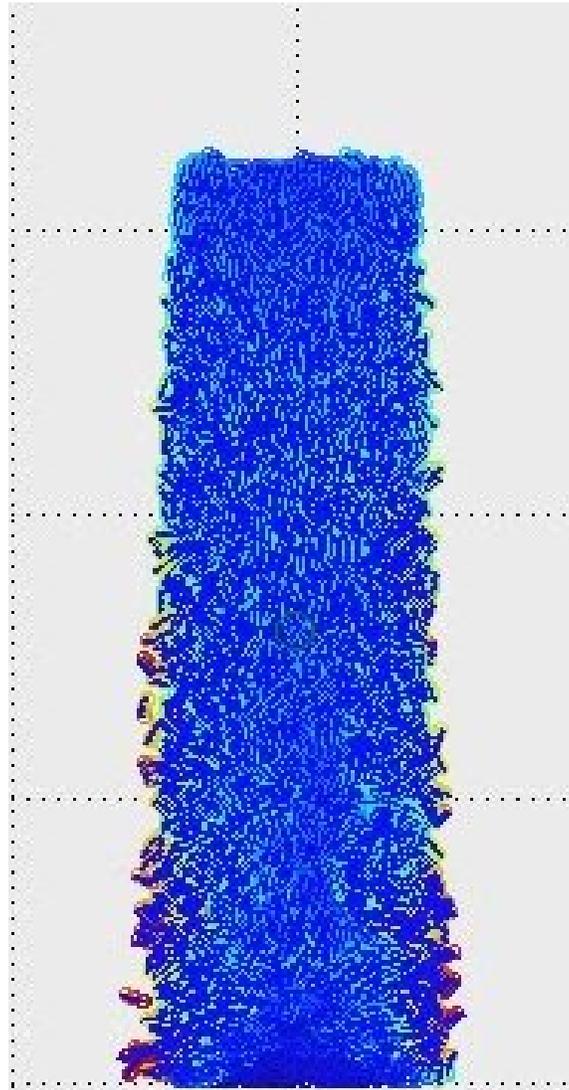


Figura 4.8: Colapso de una columna con $N_l = 5$ y a grande donde se observa el desprendimiento de los granos al principio del colapso durante la caída libre.

RESULTADOS

Conforme se incrementa el valor de a , más granos participan en el colapso y puede observarse un plano de deslizamiento sobre el cual hay una capa muy ancha de granos participando de las avalanchas. De hecho esta capa parece aumentar conforme se incrementa a . Para valores más grandes de a , se observa un colapso en el que algunos de los granos que forman la columna se desplazan horizontalmente mientras que la gran mayoría de ellos cae dentro de la estructura de la columna.

Dado que en los granos alargados las rotaciones individuales de cada grano se ven suprimidas ya que, a diferencia de los granos circulares, no pueden rotar más que alrededor de un eje perpendicular a la línea sobre la que se encuentran confinados, y que poseen más superficie efectiva sobre la que el efecto de la fricción es mayor que en los granos circulares, su movimiento se ve frustrado provocando que el reacomodo de granos ocurra en varias direcciones creando un perfil más redondo durante el flujo y avalanchas más masivas que alcanzan distancias menores.

Resultados de la distancia final

La tabla 4.3 contiene los valores de las distancias finales recorridas por las columnas formadas por granos con $N_l = 5$ y los correspondientes valores de a . Estos resultados se muestran gráficamente en la figura 4.9. De esta gráfica podemos concluir que para los granos alargados con $N_l = 5$ la distancia final recorrida también, como en el caso de granos con $N_l = 1$, presenta un incremento monótono con el valor de a . En las simulaciones realizadas, el exponente del escalamiento $\sim a^p$ del colapso se redujo en comparación al caso circular, obteniéndose, del ajuste que se muestra en la figura 4.9 el valor de $p_5 \sim 0.50 \pm 0.04$, donde el error es igual a la desviación estándar de los residuos obtenidos del ajuste. Comparando

a	R_∞
0.39	1.71
0.49	1.87
0.52	1.87
0.57	1.98
0.77	2.20
0.97	2.72
1.37	3.07
2.11	4.16
5.41	6.46
8.28	7.05

Tabla 4.3: Valores de a y de la distancia final recorrida en la dirección horizontal para $N_l = 5$ ($N_{tot} = 10000$ granos).

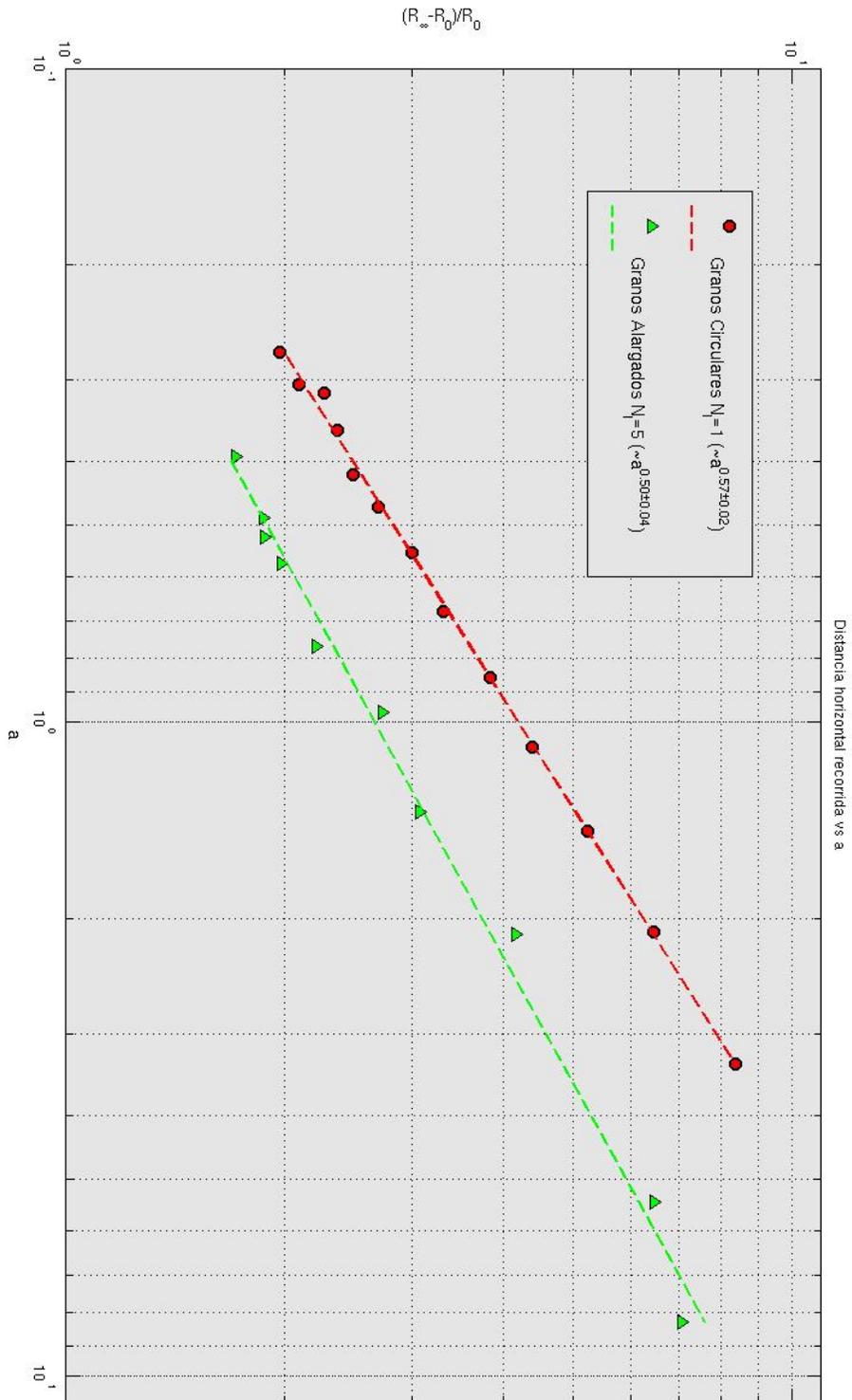
este exponente con el valor resultado de las simulaciones con granos circulares, $p_1 \sim 0.57 \pm 0.02$, nos permite cuantificar una primera diferencia importante entre los colapsos de columnas formadas por granos diferentes.

También en la figura 4.9 se muestran los resultados de la distancia final recorrida presentado en la sección anterior (figura 4.4). Puede observarse que la distancia final que recorre el grueso de la masa granular formada por granos alargados es siempre menor que la distancia que recorren los depósitos de granos circulares. Ésta es la conclusión principal de este estudio: la distancia final recorrida debida al colapso de columnas granulares es distinto si la columna está formada por granos alargados. Sin embargo es importante notar que la relación funcional se preserva: la distancia final es proporcional a una potencia de a cuyo valor es cercano al encontrado para los granos circulares.

Esta afirmación también puede determinarse de observar los perfiles de los depósitos de columnas (figuras 4.5 y 4.6). Como se puede observar, los perfiles de los depósitos de granos circulares suelen ser mucho más alargados en la dirección horizontal, lo cual es congruente con que las distancias finales recorridas sean

RESULTADOS

Figura 4.9: Distancia final recorrida en la dirección horizontal como función del parámetro a para granos alargados con $N_l = 5$



RESULTADOS PARA GRANOS CON $N_L = 5$

mayores. También puede observarse que la altura final de los depósitos, en la dirección vertical, es menor para los granos circulares; es decir recorren una mayor distancia en esta dirección, que los granos alargados.

CAPÍTULO 5

Discusión y conclusiones

Se han presentado una serie de simulaciones numéricas de columnas granulares formadas por granos de diversas elongaciones, utilizando un modelo numérico sencillo basado en el Método del Elemento Discreto. El objetivo primordial de este trabajo ha sido establecer una posible diferencia entre los colapsos de columnas hechas de material con distintas características geométricas (elongaciones). Para tal efecto, se ha creado un modelo numérico que permite generar granos de forma alargada a partir de granos individuales simples, para investigar la dependencia de la distancia final recorrida por los depósitos al término del colapso como función del parámetro a , definido como el cociente entre el radio y la altura inicial de la columna.

Después de realizar simulaciones con granos simples, con lo que se estableció la validez del modelo, toda vez que los resultados obtenidos son comparables con

otros ya publicados y es posible reproducir el comportamiento cuantitativo observado en experimentos (numéricos y de laboratorio), se concluye que el método numérico utilizado es apropiado para estudiar el sistema de interés.

Como simulación control se muestran los resultados de la distancia final recorrida por el colapso de columnas hechas por los granos simples, encontrando que esta distancia escala con el parámetro a de acuerdo a $R_\infty \sim a^{0.57 \pm 0.02}$. El exponente encontrado es cercano a los que se obtienen en algunos experimentos bidimensionales ([3, 9]). De las simulaciones realizadas no es posible determinar si existe una ley de escalamiento distinta para valores del parámetro a , como se sugiere en la literatura. Sin embargo, sí puede observarse que las distancias finales recorrida por el colapso cambian con el coeficiente de fricción entre los granos, como se sugiere en [21].

Para columnas formadas por granos alargados, se han elegido granos con una razón de 1:5 de ancho/largo, a los cuales se les denota como $N_l = 5$. En este caso, la primera observación pertinente es que las columnas, antes del colapso, ya presentan marcadas diferencias de las formadas por granos simples (con $N_l = 1$): para el mismo radio inicial de la columna, debido a la geometría de los granos individuales, aquéllas formadas por los granos con $N_l = 5$ tienden a ser más altas (tabla 4.1), de donde se concluye que los granos alargados ocupan un mayor espacio y tienen una fracción de empaquetamiento menor. En otras palabras, hay mucho más huecos dentro de las columnas formadas por los granos alargados que en las formadas por granos simples. Esto indudablemente tiene una consecuencia en el colapso, sobre todo en la parte dinámica del proceso.

La conclusión más importante de este estudio es que se observan diferencias entre los colapsos de columnas formadas por distintos granos y éstas pueden cuantificarse y ser comparadas. Para esto, determinamos las distancias finales que recor-

ren los granos al colapsarse y encontramos que los granos alargados tienden a recorrer distancias menores que los granos simples (figura 4.9). La explicación de esta observación puede encontrarse en que los granos alargados poseen una superficie efectiva mucho mayor sobre la que el efecto de la fricción es mayor que en granos simples. También, las rotaciones individuales de cada grano se ven suprimidas cuando los granos son alargados y es claro que la rotación de los granos es importante para el proceso del colapso, ya que durante las avalanchas, aquellos granos que pueden rotar podrían alcanzar distancias mayores. No es el caso de los granos alargados, ya que no pueden rotar más que alrededor de un eje perpendicular a la línea sobre la que se encuentran constreñidos y su movimiento se ve frustrado, provocando que alcancen distancias menores.

En comparación con el caso de granos circulares, el exponente conforme al cual varía la distancia final recorrida con a para granos alargados se encontró que tiene el valor de $p_l \sim 0.50 \pm 0.04$. Es decir, para granos alargados, con $N_l = 5$, $R_\infty \sim a^{0.50 \pm 0.04}$; este valor es menor que el encontrado para granos simples, para los que se obtuvo un valor de $p_s \sim 0.57 \pm 0.02$ y, hasta donde sabemos, no existe un resultado numérico o experimental con el cual compararlo, por lo que con este trabajo se hace una contribución novedosa al estudio del colapso de columnas granulares.

La observación de una diferencia cuantitativa en el colapso de columnas granulares formadas por granos simples o alargados es acorde a las observaciones realizadas con granos alargados en distintas configuraciones. Es posible que durante el colapso de las columnas exista una dirección preferencial de los granos alargados que no se observa en el colapso de granos simples. También es necesario investigar a fondo el efecto de la fricción individual entre granos y el efecto colectivo de ésta en los granos alargados, ya que debido a que cuentan con una

mayor superficie de interacción, la fricción efectiva durante la interacción será muy distinta y el efecto de ésta puede ser en parte responsable de que las distancias finales del material colapsado sean consistentemente menores que en el caso de granos simples.

Encontrar las causas por las que las columnas hechas de granos alargados presentan diferencias en sus estados finales no sólo debe de hacerse a partir de los estados iniciales y finales. La enorme ventaja de realizar simulaciones numéricas es, como hemos mencionado, el acceso total a todas las cantidades dinámicas del sistema de interés, por lo que es posible un estudio a detalle del proceso a cada instante. En particular nos interesa estudiar las avalanchas sobre la superficie de las columnas mientras estas ocurren, con el fin de caracterizar estados de mezclas y, cuando la columna está formada por granos de distintas características (por ejemplo diferentes tamaños), estados de segregación.

Finalmente, otra pregunta interesante es la existencia de una ley de escalamiento del colapso. Como hemos mencionado, varios experimentos y otras simulaciones (incluyendo las nuestras) han establecido la existencia de distintos exponentes para la dependencia de la distancia final recorrida con el parámetro a para el caso de granos simples. En este trabajo no se llevó a cabo dicho análisis más allá de obtener el exponente que mejor describe todos los resultados que obtuvimos y que mencionamos en el capítulo 3. Es importante investigar un intervalo más amplio de valores de a para establecer si existe alguna diferencia en la ley de escalamiento para granos alargados y también estudiar cómo cambia esta ley en función de la razón ancho/largo de los granos.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Allen, M. P. and Tildesley, D. J. (1989). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, USA.
- [2] Andersen, H. (1983). Rattle: A " velocity" version of the shake algorithm for molecular dynamics calculations. *Journal of Computational Physics*, 52(1):24–34.
- [3] Balmforth, N. J. and Kerswell, R. R. (2005). Granular collapse in two dimensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 538:399–428.
- [4] Blair, D. L., Neicu, T., and Kudrolli, A. (2003). Vortices in vibrated granular rods. *Physical Review E*, 67(3):031303+.
- [5] Cleary, P. (2002). Dem modelling of industrial granular flows: 3d case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. *Applied Mathematical Modelling*, 26(2):89–111.
- [6] Frette, V., Christensen, K., Malthe-Sorensen, A., Feder, J., Jossang, T., and Meakin, P. (1996). Avalanche dynamics in a pile of rice. *Nature*, 379(6560):49–52.

- [7] Jaeger, H. M., Nagel, S. R., and Behringer, R. P. (1996). Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68(4):1259–1273.
- [8] Kadanoff, L. P. (1999). Built upon sand: Theoretical ideas inspired by granular flows. *Reviews of Modern Physics*, 71(1):435–444.
- [9] Lacaze, L., Phillips, J. C., and Kerswell, R. R. (2008). Planar collapse of a granular column: Experiments and discrete element simulations. *Physics of Fluids*, 20(6).
- [10] Lajeunesse, E., Castelnau, M. A., and Vilotte, J. P. (2004). Spreading of a granular mass on a horizontal plane. *Physics of Fluids*, 16(7):2371–2381.
- [11] Langston, P. (1994). Continuous potential discrete particle simulations of stress and velocity fields in hoppers: transition from fluid to granular flow. *Chemical Engineering Science*, 49(8):1259–1275.
- [12] Lube, G., Huppert, H. E., Sparks, R. S. J., and Hallworth, M. A. (2004). Axisymmetric collapses of granular columns. *Journal of Fluid Mechanics*, 508:175–199.
- [13] Lube, G., Huppert, H. E., Stephen, and Freundt, A. (2005). Collapses of two-dimensional granular columns. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 72(4).
- [14] Rapaport, D. C. (2004). *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, second edition.
- [15] Staron, L. and Hinch, E. J. (2005). Study of the collapse of granular columns using two-dimensional discrete-grain simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 545(-1):1–27.

- [16] Staron, L. and Hinch, E. J. (2007). The spreading of a granular mass: role of grain properties and initial conditions. *Granular Matter*, 9(3-4):205–217.
- [17] Tapia-McClung, H. and Grønbech-Jensen, N. (2005). Non-iterative and exact method for constraining particles in a linear geometry. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 43(8):911–916.
- [18] Thompson, E. L. and Huppert, H. E. (2007). Granular column collapses: further experimental results. *Journal of Fluid Mechanics*, 575(-1):177–186.
- [19] Thorsten, P. and Thomas, S. (2004). *Computational Granular Dynamics*. Springer.
- [20] Volfson, D., Kudrolli, A., and Tsimring, L. S. (2004). Anisotropy-driven dynamics in vibrated granular rods. *Physical Review E*, 70(5):051312+.
- [21] Zenit, R. (2005). Computer simulations of the collapse of a granular column. *Physics of Fluids*, 17(3).