



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SEGREGACIÓN EN MEDIOS GRANULADOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

GERARDO MEJÍA RODRÍGUEZ

TUTOR(A)

DRA. CLARA EUGENIA GARZA HUME

2008





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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
Secretaría General
División de Estudios Profesionales

Votos Aprobatorios

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
Presente

Por este medio hacemos de su conocimiento que hemos revisado el trabajo escrito titulado:

"Segregación en medios granulados"

realizado por **Mejía Rodríguez Gerardo** con número de cuenta **4-0300511-6** quien ha decidido titularse mediante la opción de **tesis** en la licenciatura en **Física**. Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Propietario Dr. Arturo Olvera Chávez

Propietario Dra. Catalina Elizabeth Stern Forgach

Propietario Dra. Clara Eugenia Garza Hume
Tutora

Suplente Dr. Enrique Geffroy Aguilar

Suplente Dr. Carlos Málaga Iguíñez

Atentamente,

"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU "

Ciudad Universitaria, D. F., a 30 de julio de 2008

EL COORDINADOR DEL COMITÉ ACADÉMICO DE LA LICENCIATURA EN FÍSICA

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ

Señor sinodal: antes de firmar este documento, solicite al estudiante que le muestre la versión digital de su trabajo y verifique que la misma incluya todas las observaciones y correcciones que usted hizo sobre el mismo.

Agradecimientos

Quiero agradecer a Dios por darme la oportunidad de realizar esta tesis y de estudiar esta carrera tan hermosa.

A mis amigos como Abel, Lety, Miguel Hernandez, Gastón, Viry, Chucho, Fabiola, Mónica, Norma Angelica y todos los demás por su palabras de aliento en tiempos difíciles, y por el cariño que ellos me han dado, sobre todo a Rosa Isela Velázquez, quien me mostró que en la vida hay cosas hermosas y que sólo falta tener ganas de descubrirlas.

A la Dra. Clara E. Garza Hume por el animo que siempre recibí de su parte, más que una directora de tesis representa una gran amiga.

A todos los que de alguna forma me apoyaron en la elaboración de este trabajo, tales como Ramiro Chávez y a Ana Pérez Arteaga, quienes me apoyaron con los formatos de las películas de las simulaciones y los problemas de tipo computacional. A Roberto Zenit, quien me proporcionó y explicó el software para llevar a cabo las simulaciones.

Finalmente, a la parte más importante de mi vida, toda mi familia por el apoyo que me brindaron durante la realización de esta tesis y en el estudio de la licenciatura, a mamá por ser un ejemplo de entrega y a papá por su apoyo moral todos los días. A mis hermanos Luis, Gaby, Luz María, Zoraida y Alejandra por aguantarme en mis momentos de exasperación. Sin ellos simplemente no hubiera sido posible.

“La felicidad no esta en hacer lo que queremos, sino en querer lo que hacemos“
Confucio

Índice general

1. Mecanismos de segregación en medios granulares	7
1.1. Introducción	7
1.2. El efecto de la nuez de Brasil y el efecto inverso	9
1.3. Mecanismos más importantes en la segregación de medios granulares	10
1.3.1. Percolación	10
1.3.2. Convección	10
1.3.3. Fuerza estática compresiva	11
1.3.4. Temperatura granular	11
1.3.5. Flotación Arquimediana	12
1.3.6. Rompimiento de la equipartición de la energía	13
1.3.7. Forzamiento del gas intersticial	13
1.3.8. Fricción	13
1.4. Colisiones y deformaciones de esferas elásticas	13
1.4.1. Colisión frontal elástica	13
1.4.2. Colisiones elásticas no frontales y rotación de partículas	15
1.5. Una columna de esferas sujeta a vibraciones verticales	20
1.5.1. Parámetros involucrados en la segregación	20
1.6. Una sola partícula sobre la superficie de un medio granular	25
1.7. Competencia entre percolación y condensación	27
2. Modelos de medios granulares	31
2.1. Un enfoque estadístico del problema	31
2.2. Modelo hidrodinámico del medio granular	38
3. Segregación en una mezcla binaria	45
3.1. Naturaleza disipativa de las colisiones binarias en un medio granular	45
3.2. Leyes de balance	47
3.3. Relaciones constitutivas	52
3.4. Segregación en una mezcla binaria	55
4. Simulaciones numéricas en mecánica del medio granular	59
4.1. Introducción	59
4.1.1. Los retos de la simulación numérica	60

4.2. Diferentes métodos de simulación	60
4.2.1. Dinámica molecular	60
4.2.2. Dinámica molecular guiada por los eventos	64
4.2.3. Simulación directa de Monte Carlo	66
4.2.4. Dinámica de cuerpo rígido	68
4.2.5. Autómatas celulares	69
4.2.6. Reconstrucción del fondo a la superficie	69
4.2.7. Dinámica Browniana para la simulación de flujos granulares	70
4.3. Resultados numéricos	73
4.3.1. Descripción del Programa Utilizado para las simulaciones	74
4.3.2. Resultados numéricos	76
4.4. Conclusiones	80

Prólogo

En esta tesis se abordará el problema de segregación en medios granulares, es decir, la tendencia de las partículas que forman un medio granular a separarse de acuerdo a diversas propiedades físicas tales como: la masa, el volumen, la forma, etc.

El fenómeno de segregación tiene una gran importancia desde el punto de vista industrial, ya que industrias tales como la alimenticia, la farmacéutica y la de construcción desean evitarla, mientras que las industrias mineras la utilizan como un método de separación de ciertos tipos de materiales.

Parte de la comprensión del problema incluye que se tengan conocimiento de algunos conceptos fundamentales de la dinámica de medios granulares, algunos métodos analíticos y algunos métodos numéricos para atacar el problema, todos estos aspectos son tomados en cuenta en esta tesis como se describe a continuación.

En el capítulo uno se presentan los conceptos básicos referentes a los medios formados por granos, se da una clasificación de los medios de acuerdo a su tamaño, luego se define el problema a tratar, es decir, se plantea el problema de la “nuez de Brasil”, así denominado porque es claramente observado en los medios granulares de nueces de Brasil, el cual consiste en la elevación de las nueces más grandes cuando estas son transportadas; además se describe brevemente el problema inverso de la nuez de Brasil, el cual consiste en el desplazamiento de las más grandes hacia el fondo del contenedor. Lo siguiente es describir brevemente los diferentes mecanismos que se han propuesto para explicar el fenómeno de segregación. El capítulo concluye con una descripción de las interacciones entre diversos conjuntos de partículas.

El capítulo dos se divide básicamente en dos partes, la primera tiene como objetivo principal escribir la ecuación de estado de un medio granular partiendo de los conceptos de la mecánica estadística y considerando que el medio granular se puede tomar como un gas real. La segunda parte inicia con la ecuación de Boltzmann y con el uso de la expansión de Chapman-Enskog se llega a un modelo hidrodinámico para el medio granular.

En el capítulo tres primero se obtienen las relaciones constitutivas para el medio, así como las leyes de balance que se requieren de acuerdo con el modelo hidrodinámico. Una vez que se tienen tanto las leyes de balance como las leyes constitutivas se aplican a la ecuación de balance de momento en el modelo hidrodinámico. Así, siguiendo los cálculos que se mencionan en ([37]) se encuentra la condición para la transición entre el efecto directo y el efecto inverso de la nuez de Brasil para el caso estacionario en la aproximación de un solo intruso.

La dificultad del problema hace necesario el uso de simulaciones numéricas, que son de las herramientas más importantes en la investigación de medios granulares; es de lo que trata básicamente el capítulo cuatro. Primero se describen las ventajas de las simulaciones numéricas; luego se describen algunos de los métodos más importantes de simulación, como lo son la dinámica molecular, la dinámica molecular guiada por eventos, la simulación directa de Monte Carlo, la dinámica de cuerpo rígido, los autómatas celulares, etc. y finalmente se describen

algunos resultados numéricos que se obtuvieron usando simulación de elementos discretos, mediante un programa escrito por Carl Wassgren de la Universidad de Purdue.

El uso de los métodos numéricos hace posible tener acceso a información acerca de diversos parámetros, los cuales no pueden ser controlados en la experimentación, lo cual permite obtener información adicional acerca del problema.

Capítulo 1

Mecanismos de segregación en medios granulares

1.1. Introducción

La física de medios granulares trata básicamente con objetos macroscópicos; aquí el término macroscópico significa que al menos, es visible al ojo humano. El comportamiento colectivo de los medios granulares no se describe en términos del tradicional movimiento Browniano. Esto se debe a que el comportamiento colectivo genera temperaturas desde el punto de vista térmico tradicional del orden de 10^{11} grados Kelvin. Esto lo podemos comprobar si calculamos la energía cinética E_K de una pequeña partícula de silicato de vidrio cuyo radio típico es de $100\mu m$, y recordando que las velocidades típicas (durante la agitación) son del orden de $1\frac{cm}{s}$, se tiene que

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}(100 \times 10^{-6})(10^{-3})^2 J = 50 \times 10^{-12} J \approx 10^{-12} J. \quad (1.1)$$

Si esta temperatura se debe sólo a la agitación térmica, entonces

$$\frac{1}{2}K_B T = E_K \quad (1.2)$$

donde, $K_B = 1.3 \times 10^{-23}$ J/Kelvin es la constante de Boltzmann, entonces

$$T = \frac{2E_K}{K_B} = \frac{2(5 \times 10^{-12})}{1.3 \times 10^{-23}} \approx 10^{11} K. \quad (1.3)$$

Lo cual resulta físicamente imposible. En este sentido se le suele llamar sistemas atérmicos a un medio formado por granos. Además la energía potencial perdida, ΔE_P , para una altura aproximadamente del diámetro del grano d está dada por $\Delta E_P = mgd$, por lo que tendría que suceder que $\Delta E_P \approx E_K$.

Las leyes físicas que gobiernan el comportamiento de los medios granulares se aplican a objetos cuyos órdenes de magnitud van desde granos de unos pocos

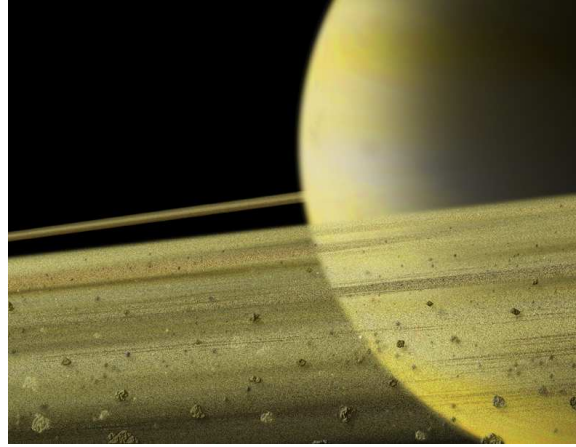


Figura 1.1: Anillos de Saturno, uno de los ejemplos más sorprendentes de un medio granular

cientos de micrómetros a bloques de hielo flotando en las regiones polares (aproximadamente 1000 Km), incluso se ha descubierto que los anillos de Saturno, (véase la Fig. 1.1) están hechos de partículas cuyos radios son aproximadamente de 1 cm distribuidas en una banda de un ancho próximo al kilómetro. La ciencia de granos cubre al menos doce órdenes de magnitud.

Así pues, para su estudio es cómodo clasificar a los medios granulares en la siguiente forma:

a) Un *material granular* está compuesto de sólidos discretos, los cuales están en contacto la mayor parte del tiempo. Este tipo de medios granulares excluye específicamente objetos tales como medios fluidizados y suspensiones. Un parámetro importante es el denominado contenido fraccional sólido de un medio granular y definido como la razón de la densidad volumétrica del medio granular total a la densidad de los sólidos constituyentes.

b) Un *polvo* es un medio granular constituido de partículas cuyo diámetro es menor que $100 \mu\text{m}$. Además se hace una distinción adicional entre polvos granulares (10 a $100 \mu\text{m}$), polvos superfinos (1 a $10 \mu\text{m}$), y polvos hiperfinos (0.1 a $1 \mu\text{m}$).

c) Un *sólido granular* es un medio formado por granos cuyos tamaños están entre los 100 y $3000 \mu\text{m}$.

d) Un *sólido roto* es un medio formado por partículas cuyos tamaños son mayores que 3 mm .

La importancia del estudio de la dinámica de medios granulares reside en el hecho de que las industrias procesan enormes cantidades de materiales granulares cada año; de hecho, el costo económico del procesamiento de medios granulares sólo se ve superado por el costo del manejo del agua. En cualquier proceso de operación donde se trabaja con medios granulares se está a merced

de la segregación, es decir, de la separación de las diferentes partículas que forman el medio granular de acuerdo con sus propiedades mecánicas, tales como son la densidad, el diámetro de los granos, etc.

Las mezclas de medios granulares exhiben una variedad de comportamientos intrigantes, algunos de los cuales no tienen paralelo en la mecánica de fluidos. Dichos comportamientos tales como la segregación, el bloqueo por arcos, el flujo del medio, etc; los cuales se observan cuando el medio está sometido a algunos de los siguientes procesos

- a) Vaciado de granos: en este proceso se observa la formación de ciertos patrones regulares debido a que las partículas pueden presentar el fenómeno de segregación de acuerdo a su tamaño.
- b) Agitación de granos: la agitación del medio granular puede producir segregación o mezclado, dependiendo de ciertos parámetros.
- c) Granos en un recipiente girando: pueden generar patrones dinámicos de segregación tanto axiales como radiales.

Debido a este clase de comportamientos es que los medios granulares no se consideran como fluidos, en el sentido estricto, a pesar de la tendencia a fluir bajo la acción de fuerzas cortantes.

1.2. El efecto de la nuez de Brasil y el efecto inverso

Uno de los ejemplos más claros que distinguen a los medios granulares de los fluidos, es el denominado “efecto de la nuez de Brasil”. El efecto de la nuez de Brasil consiste en que al agitar un recipiente con una mezcla de partículas de diferentes tamaños, las más grandes generalmente suben hacia la superficie. En particular, en un contenedor de nueces mezcladas, las nueces de Brasil, que son las más grandes, parecen siempre subir a la superficie libre.

Hay que decir que, bajo condiciones apropiadas, se puede dar el efecto inverso, es decir, que cuando se agita una mezcla granular, los intrusos de tamaño más grande tienden a irse al fondo del recipiente que los contiene.

Entonces cabe hacernos las preguntas: ¿Bajo qué condiciones se da el efecto de la nuez de Brasil?, ¿Bajo qué condiciones se da el efecto inverso?, ¿Cuáles son los mecanismos que intervienen en ambos efectos?

Los procesos de segregación en medios granulares se pueden ver como generados por dos procesos, en la agitación vertical del recipiente que contiene la mezcla granular, debido a la fluidización del medio granular; o debida a los esfuerzos de corte que pueda sufrir el medio, ejemplos de este último se dan en la rotación del contenedor y en el vaciado.

El efecto es de gran interés para algunas operaciones de manufactura; una vez que una mezcla heterogénea de material granular se produce, usualmente es indeseable que se produzca el fenómeno de segregación para los diferentes tipos de partículas. Varios factores determinan la severidad del efecto de la nuez de Brasil, incluyendo los tamaños y densidades de la partículas, la presión de

cualquier gas entre las partículas y la forma del contenedor.

El efecto puede también ser de interés en geofísica o geología cuando se estudian los efectos de la vibración sobre arena u otros materiales que tienden a perder contactos.

1.3. Mecanismos más importantes en la segregación de medios granulares

Una variedad de mecanismos se han propuesto para describir la separación de partículas de dos tamaños diferentes en una mezcla en un contenedor sujeto a vibraciones verticales.

El objetivo de esta Sección es revisar los diferentes mecanismos propuestos para el fenómeno de segregación. La Tabla 1.1 muestra como influyen los incrementos de algunas razones de las diversas propiedades mecánicas de los granos que forman el medio.

1.3.1. Percolación

Cuando un recipiente que contiene granos está sujeto a vibraciones verticales, las capas granulares se expanden, permitiendo que las partículas pequeñas caigan bajo las partículas grandes, denominadas intrusos. Cuando la capa se relaja a su estado de equilibrio, el intruso aparece por encima de las partículas pequeñas que quedaron debajo.

Los efectos de arco, permiten que las partículas más grandes sean soportadas por arcos, los cuales están constituidos por las partículas más pequeñas, las cuales ayudando así al proceso de percolación ([15]).

Hay que decir, que el proceso de percolación es más patente cuando la razón de los diámetros de las partículas d_l/d_s se incrementa([35]).

La percolación funciona sólo para excitaciones débiles; ya que para excitaciones fuertes los huecos que se forman en el medio son bastante grandes, lo que implica que la probabilidad de que los intrusos se acomoden en dichos huecos llegue a ser comparable a la de las partículas pequeñas.

1.3.2. Convección

En este mecanismo, el medio granular ejecuta ciclos de convección, con amplias regiones de flujo hacia arriba en el centro del contenedor y regiones estrechas de flujo hacia abajo cerca de las paredes del mismo (véase la Figura 4.3) y entonces la segregación se da debido a que las partículas más grandes no pueden penetrar en las regiones de flujo hacia abajo y por lo tanto tienden a quedarse sobre la superficie.

Los dos mecanismos descritos anteriormente generalmente segregan las partículas más grandes sobre las pequeñas, es decir, producen el efecto de la nuez de Brasil, independientemente de las características tales como la masa y forma del

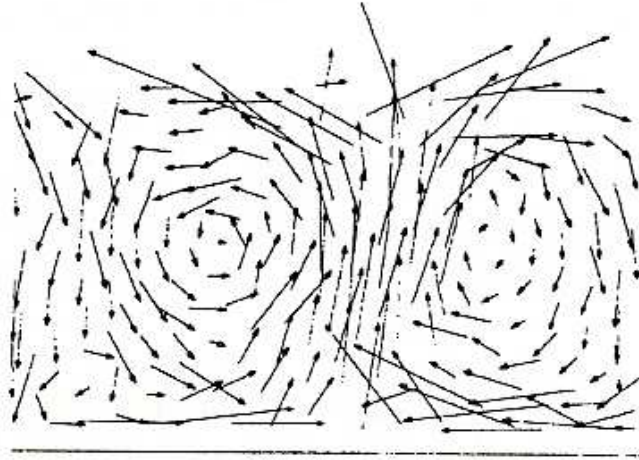


Figura 1.2: Flujo convectivo, la región de convección en el centro es más amplia que cerca de las paredes. Las velocidades son más altas para las partículas alejadas del centro convectivo.

intruso. Sin embargo, Schroter, et al en ([35]) afirma, que en algunas condiciones, una partícula grande y pesada migra a la superficie del recipiente agitado verticalmente, mientras que una partícula igualmente grande pero ligera migra al fondo.

Los intrusos con densidades comparables a sus alrededores, ejecutan circuitos convectivos, denominados rollos. Se encuentra que los intrusos pesados ejecutan circuitos rápidos y superficiales, mientras que los intrusos ligeros se sumergen profundamente en el contenedor, regresando a la superficie de forma poco frecuente.

1.3.3. Fuerza estática compresiva

Trujillo, et al en ([37]) encontraron que en presencia del campo gravitacional, cualquier diferencia de tamaño da origen a otro término (véase la sección 3.4) el cual tiene el nombre de fuerza estática compresiva. Esta fuerza siempre nos lleva al efecto inverso cuando el número de intrusos es proporcional a $\left(\frac{d_l}{d_s}\right)^3 - 1$.

1.3.4. Temperatura granular

Antes de discutir los siguientes dos mecanismos, es necesario definir la temperatura granular. Para un medio granular uno puede definir la temperatura T que corresponde a la energía cinética del movimiento aleatorio de las partículas

como:

$$T = \frac{m}{3} \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle \quad (1.4)$$

donde m es la masa de la partícula y v es su velocidad; T en una mezcla granular agitada no sólo depende de la posición en la mezcla y la fase de la agitación, sino también de la aceleración de agitación Γ y del número de partículas en el contenedor. Como se puede ver, en una mezcla granular agitada uniformemente (es decir todas las partículas tienen aproximadamente la misma velocidad) los intrusos más pesados tendrán mayor temperatura granular que sus alrededores, mientras que los granos cuya masa sea menor que los alrededores, tendrán menor temperatura granular.

Dos diferentes mecanismos de segregación se presentan debido a la temperatura granular basados en analogías con las transiciones de fase sólido-líquido.

Condensación

Hong ([13]) sugiere, basado en la observación, que cuando se incrementa la aceleración de agitación de un conjunto monodisperso (medio formado por partículas de la misma especie) de partículas llegará a ser vibro-fluidizado. Suponiendo que la temperatura granular es espacialmente homogénea a través del conjunto, postula la existencia de una temperatura crítica T^c arriba de la cual todas las partículas están fluidizadas. Para T más pequeña que T^c una fracción de partículas podría condensarse en el fondo del contenedor.

Al igualar la energía cinética promedio de las partículas con la energía potencial de una partícula con diámetro d en la capa superior se encuentra que T^c es proporcional a $\rho d^3 h$, donde ρ es la densidad del material y h es la altura de la capa particular.

Difusión térmica

Hsiau y Hunt en ([14]) encontraron que en presencia de un gradiente de temperatura granular las partículas más pesadas se mueven a lugares con T más baja y así caen las partículas más ligeras, debido a que dentro de la mezcla la temperatura granular es menor que en la superficie libre.

1.3.5. Flotación Arquimediana

La disipación de energía durante las colisiones en el medio granular genera una diferencia de temperatura granular entre la región cercana al intruso y las regiones alejadas de él. Dicha diferencia de temperatura es debida a que el número de colisiones sobre la superficie se incrementa cuando el tamaño del intruso crece, mientras que la densidad local de energía decrece. Así, la región más cercana del intruso está más caliente que las regiones alejadas de él. De esta diferencia de temperatura se puede concluir que se tiene una diferencia en la densidad del fluido granular. Esto nos lleva a una fuerza de flotación que es la responsable del movimiento hacia arriba del intruso ([38]).

1.3.6. Rompimiento de la equipartición de la energía

En la mayoría de los trabajos sobre segregación en medios granulares se supone al derivar las ecuaciones que describen el proceso, que se cumple la equipartición de la energía en el sistema. Sin embargo, debido a que las colisiones en el medio no son elásticas, es necesario considerar que esta hipótesis no se cumple. Esto nos lleva a encontrar fuerzas de segregación que son comparables a las fuerzas que aparecen en los cálculos donde se supone la equipartición de la energía ([10]).

El término que aparece debido al rompimiento de la equipartición de la energía se llama flotación Pseudo-térmica.

1.3.7. Forzamiento del gas intersticial

En el estudio hecho en ([32]) se encontró que cuando se trabaja con partículas esféricas. La elevación del intruso se encuentra influenciada por la humedad y el aire dentro de los intersticios de la capa de partículas. Como consecuencia de la interacción entre el gas intersticial y las partículas que forman el medio granular se genera una carga electrostática la cual disminuye la razón de elevación del intruso.

1.3.8. Fricción

Se ha demostrado experimentalmente ([20]) que la fricción de corte entre dos partículas durante las colisiones puede llevar al fenómeno de convección. Como ya se ha dicho, en la convección se tiene un movimiento hacia arriba por parte de las partículas en el centro del contenedor, y hacia abajo en las paredes. Esto se puede explicar en términos de diferencias de fricción de corte encontrada por las partículas durante el movimiento hacia arriba y hacia abajo. La hipótesis es que la fricción debería ser más fuerte en la parte superior del ciclo de vibración, ya que las partículas están más comprimidas unas contra otras y con la pared. Por otro lado, la fricción puede ser más pequeña en la parte baja del ciclo, ya que las partículas están mucho menos empaquetadas, y así la fricción es mucho menor.

El cuadro 1.1 ([35]) muestra cómo las variaciones de algunos de los parámetros afectan el tipo de fenómeno que se da cuando el medio granular está sujeto vibraciones verticales

1.4. Colisiones y deformaciones de esferas elásticas

1.4.1. Colisión frontal elástica

Las colisiones frontales elásticas entre dos partículas esféricas son el caso más sencillo de analizar, por ello se empezará por revisar este tipo de colisiones. En este caso en particular, el choque ocurre sobre el eje que pasa a través del

Mecanismo	Efecto	$\frac{dL}{ds}$	$\frac{V_L}{V_S}$	h_{total}
Percolación	BNE	+	-	0
Fuerza estática compresiva	RBNE	+	?	?
Convección	BNE	+	-	-
Convección	Mezclado	-	+	-
Condensación	BNE	-	-	0
Condensación	RBNE	+	+	0
Difusión térmica	?	?	?	?
R. en la equipartición	RBNE	+	?	0
R. en la equipartición	BNE	+	-	0

Cuadro 1.1: Efecto de un incremento de la razón de los diámetros, razón del volumen de los intrusos al volumen total del medio y el ancho total de la capa sobre los diversos mecanismos de segregación propuestos. Los símbolos +, 0 y - corresponden a un incremento, constancia o decremento del efecto en la segunda línea. BNE se refiere a el efecto de la nuez de Brasil, mientras que RBNE se refiere a el efecto inverso.

centro de cada esfera, lo cual significa que las velocidades son colineales. Esto es, por supuesto, un evento altamente improbable con sólidos granulares reales, los cuales la mayoría de veces se comportan como objetos inelásticos, sujetos a la fricción y experimentado colisiones a diferentes ángulos. No obstante, el caso ideal es útil ya que involucra dos principios fundamentales: conservación de energía y momento.

Consideremos dos partículas de masas m_1 y m_2 con velocidades v_1 y v_2 respectivamente; la velocidad después del impacto está dada por

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} v_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} v_2 \\ u_2 &= \frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 + m_2 v_2. \end{aligned} \quad (1.5)$$

De hecho, las colisiones entre granos reales siempre están asociadas a pérdidas de momento y de energía. Alguna fracción del momento incidente es cedido por las partículas que colisionan para formar ondas de sonido que se propagan en el interior del medio. Una pérdida de energía puede resultar de una deformación permanente durante la colisión. Se observa experimentalmente que una bola chocando contra una pared vertical de masa infinita con una velocidad \mathbf{v} rebota con una menor velocidad $-\varepsilon_p \mathbf{v}$ (con $\varepsilon_p \leq 1$). Como primera aproximación, y en el caso de colisiones frontales entre dos esferas con propiedades físicas iguales, es conveniente describir el déficit de velocidad en el marco de referencia del centro de gravedad del sistema por una ecuación matricial de la forma

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = C_{1,2} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1-\varepsilon}{2} & \frac{1+\varepsilon}{2} \\ \frac{1+\varepsilon}{2} & \frac{1-\varepsilon}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}, \quad (1.6)$$

donde ε es llamado el **coeficiente elástico de restitución**. Por supuesto, $\varepsilon = 0$ para un colisión completamente inelástica y $\varepsilon = 1$ para una completamente elástica.

La colisión de una pelota con un plano de masa infinita se puede ser describir en un formalismo similar por la ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \end{bmatrix} = C_{0,1} \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 + \varepsilon_p & -\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

Sean P y P' el momento del sistema total antes e inmediatamente después del impacto, en el marco de referencia del centro de masa se puede escribir

$$\begin{aligned} P &= m_{12}(v_1 - v_2), \\ P' &= m_{12}(u_1 - u_2), \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde $m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ es a masa reducida del sistema de dos objetos chocando. Es sencillo probar que (1.6) y (1.7) son consistentes con la definición de ε en la forma

$$\varepsilon = -\frac{P'}{P} = -\frac{u_1 - u_2}{v_1 - v_2}, \quad (1.9)$$

donde el signo menos enfrente de las razones toma en cuenta el hecho de que las velocidades tienen dirección invertida después de la colisión. El cambio en la energía cinética del sistema ΔE_{kin} después del choque está dado por

$$\Delta E_{kin} = -\frac{1}{2} m_{12} (1 - \varepsilon^2) (v_1 - v_2)^2. \quad (1.10)$$

1.4.2. Colisiones elásticas no frontales y rotación de partículas

Como ya se hizo notar, una colisión elástica frontal en el seno del medio granular, es un evento extremadamente improbable; en una primera aproximación. En un medio granular la realidad es mucho más compleja. Ésta incluye colisiones no frontales y efectos de fricción los cuales llevan a desplazamientos angulares entre las partículas que chocan y entonces debe considerarse el momento angular entre las partículas vecinas.

Una bola lanzada contra una pared

Considérese el simple problema de la colisión entre una bola esférica y una pared vertical. Sean v_x y v_y las componentes de la velocidad del centro de masa de la bola en el instante t_0 de impacto en el plano de colisión. Sea ω_0 su momento angular justo antes del impacto perpendicular al plano de colisión. Supongamos que el vector de rotación es perpendicular al plano formado por el vector de desplazamiento y un corte vertical de la pared. El objetivo es determinar las componentes u_x y u_y de la velocidad inmediatamente después del choque, así como el momento angular final ω_1 . Sean X y Y las componentes

del momento lineal en el impacto, sin pérdida de generalidad se puede tomar $v_x > 0$, $u_x > 0$ y $X > 0$. Despreciando la fricción en este simple experimento, entonces la solución coincide con la encontrada en la subsección anterior. Simplemente se escribe $u_x = -\varepsilon v_x$. la componente tangencial Y del momento (X, Y) es cero y los teoremas fundamentales de la mecánica clásica producen:

$$\begin{aligned} m(u_x - v_x) &= 0 \\ u_y &= v_y \\ \omega_1 &= \omega_2. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Si por otro lado, suponemos que la fricción no es nula entre la bola y la pared en el sentido que existe un coeficiente de fricción μ , se pueden distinguir dos casos.

1.-La partícula se derrapa sobre la pared, en este caso la velocidad de derrapamiento amiento seguirá siendo positiva durante toda la colisión

En este caso, el sistema de ecuaciones que describen el intercambio de momento, tanto lineal como angular, se escribe en la forma:

$$\begin{aligned} m(u_x - v_x) &= X, \\ m(u_y - v_y) &= -\mu X, \\ \frac{2}{5}ma^2(\omega_1 - \omega_0) &= a\mu X, \\ u_x &= -\varepsilon v_x, \end{aligned} \tag{1.12}$$

donde m es la masa de la bola y a es su radio. Como se puede ver, éste es un sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas (X, u_x, u_y, ω_1) , el cual aparentemente se puede resolver si todas las cantidades importantes antes de la colisión son dadas y si los coeficientes de fricción μ y restitución elástica ε son conocidos.

2. No hay derrapamiento, la velocidad de la bola es cero en cualquier tiempo t_1 durante la colisión. En este caso las relaciones generales se escriben en la forma:

$$\begin{aligned} m(u_x - v_x) &= X, \\ m(u_y - v_y) &= Y, \\ \frac{2}{5}ma^2(\omega_1 - \omega_0) &= -aY, \\ u_x &= -\varepsilon v_x, \\ u_y - a\omega_1 &= 0. \end{aligned} \tag{1.13}$$

Es decir, se tiene un sistema de cinco ecuaciones en cinco incógnitas.

Considerando un instante $t \in [t_0, t_1]$, y llamando η y ζ las componentes de la fuerza de reacción durante el impacto, las ecuaciones de movimiento en ese instante particular son

$$\begin{aligned} m \frac{dv_x}{dt} &= \eta, \\ m \frac{dv_y}{dt} &= \zeta, \end{aligned}$$

$$\frac{2}{5}ma^2\frac{d\omega}{dt} = -\zeta a. \quad (1.14)$$

Éstas dan la siguiente condición concerniente a la velocidad de desplazamiento

$$m\frac{d}{dt}(v_y - a\omega) = \frac{7}{2}\zeta, \quad (1.15)$$

de la cual se puede ver que ζ , la componente tangencial de la fuerza de reacción durante el contacto, tiene signo opuesto a $(v_y - a\omega)$, es decir, esta sólo puede decrecer en magnitud y llegar finalmente a cero durante la colisión. Para mas detalles veáse ([6])

Colisión no frontal entre dos esferas elásticas con fricción

Antes de ir sobre el problema planteado en este apartado es necesario conocer las leyes que rigen la fricción. Dichas leyes son empíricas y son tres:

a) La fuerza de tracción requerida al poner un sistema en movimiento es proporcional al peso de las componentes individuales del sistema.

b) La fuerza de tracción es independiente del área de los sólidos que están en contacto.

c) Debe hacerse una distinción entre la fricción estática cuando los sólidos están inicialmente en reposo, y la fricción dinámica, cuando los sólidos están ya en movimiento y deben mantenerse en movimiento a una rapidez constante. Cada caso es caracterizado por su propio coeficiente μ_s para la fricción estática y μ_d para la fricción dinámica. Además, se tiene que la gran mayoría de de materiales tienen coeficientes de fricción tales que

$$\mu_s \geq \mu_d. \quad (1.16)$$

Estas tres leyes son conocidas como las leyes de fricción seca de Coulomb.

Una vez que hemos introducido los dos parámetros fundamentales μ_s y μ_d para caracterizar las interacciones en el caso de la fricción seca, así como el coeficiente ε como medida de la pérdida de momento, es necesario invocar un nuevo parámetro, el cual llamaremos el coeficiente de restitución, denotado por β . Su efecto es el de amortiguar la velocidad tangencial en el punto de contacto cuando las partículas retroceden después de la colisión.

Consideremos dos partículas de diámetro d_1 y d_2 y masas m_1 y m_2 respectivamente. Las posiciones de los centros de las esferas son descritas por los vectores \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 . El vector unitario asociado con la normal al plano de contacto es denotado por \mathbf{n} . Este puede ser escrito en la forma:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (1.17)$$

La velocidad relativa de las dos partículas en el punto de contacto está dada por

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 - \left(\frac{d_1}{2}\omega_1 + \frac{d_2}{2}\omega_2 \right), \quad (1.18)$$

donde \mathbf{v}_i y ω_i son las velocidades de traslación y rotación, respectivamente, de la partícula i antes de la colisión. Hay que notar que la magnitud de la velocidad relativa $|\mathbf{v}_c|$ se incrementa cuando las velocidades individuales apuntan en direcciones opuestas y cuando los vectores de rotación de estas partículas apuntan en la misma dirección. La velocidad \mathbf{v}_c tiene una componente normal $\mathbf{v}_c^{(n)} = (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$, mientras que su componente tangencial es $\mathbf{v}_c^{(t)} = \mathbf{v}_c - \mathbf{v}_c^{(n)}$. El vector $\mathbf{v}_c^{(t)}$ define un vector tangencial unitario tal que

$$\mathbf{t} = \frac{\mathbf{v}_c^{(t)}}{|\mathbf{v}_c^{(t)}|}.$$

El ángulo de impacto γ está definido como el ángulo entre la normal \mathbf{n} y la velocidad relativa \mathbf{v}_c , y es tal que $\gamma \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$.

Ahora consideremos lo que pasa con el momento durante la colisión. Usando la misma convención que antes, sea \mathbf{u}_i la velocidad inmediatamente después de la colisión. Tenemos

$$\Delta \mathbf{P} = m_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{v}_1) = -m_2(\mathbf{u}_2 - \mathbf{v}_2). \quad (1.19)$$

La componente normal de $\Delta \mathbf{P}$ no tiene efecto sobre la velocidad angular de rotación. Pero la componente tangencial sí, creando una torca sobre el brazo definido por el vector $-(\frac{d_1}{2})\mathbf{n}$, el cambio en el momento $\Delta \mathbf{P}$ causa un cambio en el momento angular tal que

$$-\mathbf{n} \times \mathbf{P} = \frac{2I}{d}(\omega' - \omega), \quad (1.20)$$

donde I es el momento de inercia con respecto al centro de la partícula y ω' es la rapidez angular de rotación después de la colisión.

Si se conoce $\Delta \mathbf{P}$, es posible conocer todas las velocidades importantes después de la colisión usando las ecuaciones (1.19) y (1.20), de las cuales se obtienen

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \mathbf{v}_1 + \frac{\Delta \mathbf{P}}{m_1}, \\ \mathbf{v}_2 &= \mathbf{v}_2 - \frac{\Delta \mathbf{P}}{m_2}, \\ \omega'_1 &= \omega_1 - \frac{d_1}{2I_1} \mathbf{n} \times \Delta \mathbf{P}, \\ \omega'_2 &= \omega_2 - \frac{d_2}{2I_2} \mathbf{n} \times \Delta \mathbf{P}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Ahora, recordando la definición de ε , dada por

$$\mathbf{u}_c^{(n)} = -\varepsilon \mathbf{v}_c^{(n)}, \quad (1.22)$$

la cual relaciona las velocidades de traslación antes y después de la colisión, aplicando la ecuación (1.22) a la componente normal de la suma $\frac{\Delta \mathbf{P}}{m_1} + \frac{\Delta \mathbf{P}}{m_2}$ se

puede calcular la componente normal del cambio en el momento lineal, dando como resultado

$$\Delta \mathbf{P}^{(n)} = -m_{12}(1 + \varepsilon)\mathbf{v}_c^{(n)}, \quad (1.23)$$

donde, como antes, m_{12} es la masa reducida del sistema compuesto de m_1 y m_2 .

La ley de Coulomb establece una relación entre las componentes normal y tangencial de $\Delta \mathbf{P}$, por medio de $|\Delta \mathbf{P}^{(t)}| = \mu |\Delta \mathbf{P}^{(n)}|$. Ya que las colisiones son siempre disipativas, el vector $\Delta \mathbf{P}^{(t)}$ debe estar alineado sobre \mathbf{t} . Así, se puede escribir

$$\Delta \mathbf{P}^{(t)} = \mu m_{12}(1 + \varepsilon)v_c \cos(\gamma)\mathbf{t}, \quad (1.24)$$

donde $v_c^n = -v_c \cos(\gamma)$, ya que $\cos(\gamma)$ es siempre negativa. Se tiene además la relación $\mathbf{t} = \frac{\mathbf{v}_c^t}{[v_c \sin(\gamma)]}$. Combinando las ecuaciones (1.23) y (1.24) se obtiene una expresión para el cambio en el momento angular $\Delta \mathbf{P}$

$$\Delta \mathbf{P} = m_{12}(1 + \varepsilon)[\mu \mathbf{v}_c^{(t)} \cot(\gamma) - \mathbf{v}_c^{(n)}]. \quad (1.25)$$

El coeficiente tangencial de restitución

Es interesante considerar lo que sucede en el caso de una colisión central, la cual corresponde a $\gamma \rightarrow \pi$. Ya que $\cot(\gamma) \rightarrow -\infty$, el cambio en el momento $\Delta \mathbf{P}$ tiende a infinito, lo cual es físicamente imposible. Las ecuaciones han sido derivadas en un sentido general, es decir, que contengan la física del problema, sin embargo, como se puede notar no describen las colisiones tangenciales. Esto es porque a pesar de todo lo anterior, hay que considerar otro mecanismo, el cual ha sido ignorado hasta ahora en esta descripción. Específicamente, en el momento del impacto, las dos partículas que interactúan pueden rodar sobre si mismas sin deslizarse. La posibilidad de un movimiento de pivoteo de un objeto sobre otro no fue incluido en el modelo anterior. Tales movimientos involucran momentos de inercia a través del centro o del eje de rotación de las partículas en interacción.

En lugar de desarrollar un modelo más complejo que tome en cuenta el rodamiento sin deslizamiento (o viceversa), es mucho mejor generalizar de forma heurística el modelo existente por medio de la introducción de un parámetro adicional, el cual será llamado el coeficiente tangencial de restitución, y se denotará por β . Entonces bajo estas condiciones, la ecuación (1.24) se modifica tomando la forma

$$\Delta \mathbf{P} = -m_{12}(1 + \varepsilon)\mathbf{v}_c^{(n)} - \frac{2}{7}m_{12}(1 + \beta)\mathbf{v}_c^{(t)}. \quad (1.26)$$

El segundo término en (1.26) tiene la misma forma que el primero, excepto por el factor $\frac{2}{7}$, el cual aparece debido al momento de inercia de una esfera sólida llena. En vista de las observaciones previas, el coeficiente tangencial de restitución debe ser igual al más pequeño de los dos valores β_0 o β_1 , los cuales corresponden a uno de dos posibles regímenes:

a) Grandes valores del ángulo $\gamma(\gamma \geq \gamma_0)$ corresponden al deslizamiento de contacto y en este caso, la elección correcta para β es $\beta = \beta_0$ con $\beta_0 \in [-1, +1]$.

b) Pequeños valores de γ ($\gamma \leq \gamma_0$) corresponden a una colisión para la cual la interacción puede ser descrita en términos de la fricción seca y restitución elástica. En este caso, la elección correcta es $\beta = \beta_1$, con $\beta = -1 - \frac{7}{2}\mu(1 + \varepsilon) \cot(\gamma)$.

El ángulo γ_0 marca una línea de división entre los dos regímenes, lo que ocurre cuando $\beta_0 = \beta_1$. El valor de γ_0 está dado por la ecuación

$$-\tan(\gamma_0) = \frac{7}{2}\mu \frac{1 + \varepsilon}{1 + \beta_0}. \quad (1.27)$$

Deformación durante una colisión frontal: Problema de Hertz

Considérense dos esferas idénticas de radio R y masa M , aproximándose una a la otra con una velocidad relativa v . Hertz mostró que la energía elástica E_e acumulada por dos esferas deformadas una profundidad h , está dada por ([6]):

$$E_e = \frac{1}{2}kh^{5/2}. \quad (1.28)$$

Esta ecuación muestra cómo la energía que se ve involucrada en la colisión depende de la distancia de penetración, es decir de la deformación que sufren las superficies en contacto. En (1.28)

$$k = \frac{4\sqrt{2}}{15} \frac{E}{1 - \sigma^2} \sqrt{R} \quad (1.29)$$

Las cantidades E y σ se conocen como el módulo de Young y de Poisson respectivamente.

1.5. Una columna de esferas sujeta a vibraciones verticales

El problema de una columna de esferas sujetas a vibraciones verticales es de suma importancia, ya que como se habrá notado anteriormente, este tipo de movimientos lleva a generar el fenómeno de segregación. En particular a lo largo de este trabajo se supondrá que las partículas están en un contenedor sometido a vibraciones verticales, (véase Fig 1.3)

1.5.1. Parámetros involucrados en la segregación

Si suponemos que las vibraciones a las que está sometido el recipiente que contiene al medio granular son cosenoidal, es decir, la perturbación es de la forma:

$$y = A \cos(\omega t), \quad (1.30)$$

entonces los parámetros sobre los cuales se puede tener control al realizar un experimento son:

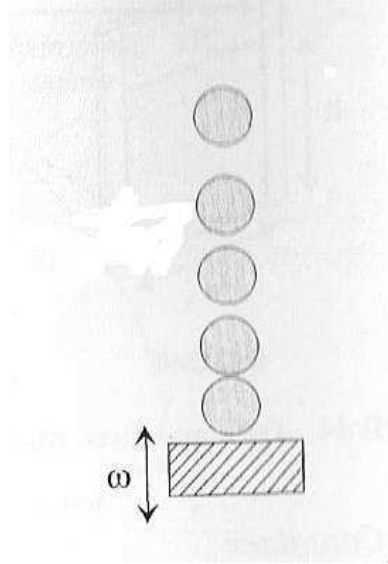


Figura 1.3: Columna de granos sujeta a vibraciones verticales

- a) La frecuencia f de vibración, esta relacionada con ω por medio de la relación $\omega = 2\pi f$.
- b) La amplitud A de la vibración.
- c) La razón de los diámetros ($\frac{d_l}{d_s}$), aquí hemos utilizado los subíndices l y s , para denotar los diámetros de las partículas grandes y las partículas pequeñas respectivamente. A las partículas grandes se les suele designar mediante el nombre de intrusos.
- d) La razón del volumen total de los intrusos en el contenedor al volumen del contenedor

$$\frac{\sum(V_l)}{V},$$

donde V es el volumen total del contenedor. El cual se denomina fracción volumétrica de los intrusos.

No es necesario tomar las razones de volúmenes del intruso con respecto al volumen de una partícula pequeña como lo demuestra el siguiente cálculo:

$$\frac{V_l}{V_s} = \frac{\frac{4}{3\pi r_l^3}}{\frac{4}{3\pi r_s^3}} = \left(\frac{r_l}{r_s}\right)^3 = \left(\frac{d_l}{d_s}\right)^3$$

y por lo tanto, tomar las razones de los volúmenes es equivalente a tomar las razones de los diámetros de las partículas.

- e) La aceleración máxima

$$\Gamma = \frac{4\pi^2 A f^2}{g}.$$

Además de estos parámetros existen otros como el tiempo que duran las colisiones entre partículas y la distancia de penetración, que son importantes para la simulación numérica.

Análisis matemático del problema

La forma más simple de modelar el problema es resolver, sobre una base de evento por evento (dinámica molecular basada en fuerzas, veáse la sección 4.2.1), aplicado a las ecuaciones de Newton. Se puede trabajar en una descripción iterativa involucrando ecuaciones de movimientos balísticos, junto con las ecuaciones que gobiernan las colisiones entre ellas mismas, ec. (1.6) para colisiones entre partículas y ec. (1.7) para colisiones entre una partícula y una placa vibrando. La ecuación balística se escribe de la forma

$$z_i = z_{i0}(\tau) + v_{i0}\tau - \frac{1}{2}g\tau^2 \quad (1.31)$$

donde z_{i0} y v_{i0} son medidas inmediatamente antes de la colisión. Las colisiones son descritas por ecuaciones lineales de la forma

$$\begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \end{bmatrix} = C_{i-1,i} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}, \quad (1.32)$$

donde u_i y v_i son las velocidades de la partícula i inmediatamente antes y después de la colisión medida en el marco de referencia del centro de masa. Por convención, u_0 y v_0 se referirán a la placa vibrante.

Cómo llevar a cabo tales cálculos constituye un importante problema en física. Esto involucra tomar algunas decisiones acerca de la sucesión de eventos, en este caso los vuelos balísticos y las colisiones entre las N partículas y las placas vibrantes, sin ir a los detalles de la simulación numérica lo que es el principal tema en el capítulo 4. En lugar de intentar resolver aquí las ecuaciones de movimiento se discutirán algunos aspectos relativos al comportamiento del medio como función de algunos de los parámetros.

Cuando el coeficiente de restitución es alto, como es el caso para bolas de acero ($\varepsilon = 0.9$), el parámetro clave es la aceleración normalizada (veáse [6]), ya que cuando una columna de bolas está sujeta a vibraciones fuertes se observa un estado fluidizado. Por el contrario, cuando la aceleración es baja, la columna sigue formando un cúmulo continuo; es decir, el conjunto se moverá colectivamente en fase con la placa vibrante. Se dice entonces que el sistema está acoplado a la excitación. Este comportamiento se mantiene estable sobre un amplio rango de parámetros de la perturbación. Al menos intuitivamente, se puede entender con la ayuda del siguiente argumento. Considérese la trayectoria balística de un grupo de esferas moviéndose como una sola. Ya que las esferas forman un cúmulo, la mayor parte de la energía que ellas reciben de la vibración de la placa

es disipada en colisiones múltiples y repetidas. Bajo tales condiciones, el coeficiente elástico de restitución de la columna es muy pequeño y el problema es idéntico al de una bola inelástica, cuyo caso fue estudiado en la sección anterior.

En cambio, para un objeto inelástico sobre una placa vibrante cuyo movimiento vertical es sinusoidal con amplitud A y frecuencia f , el objeto despega cuando la aceleración impartida por la placa es tal que $A\omega^2 > g$. Entonces la partícula deja la placa y sigue una trayectoria balística, cayendo hacia la placa.

Realicemos el siguiente cálculo informativo. Sea t^* el tiempo para el cual la aceleración normalizada Γ llega a ser igual a 1; éste está dado por

$$t^* = \frac{1}{\omega} \cos^{-1} \left(\frac{g}{A\omega^2} \right). \quad (1.33)$$

En aquel momento, el objeto es lanzado hacia arriba con velocidad inicial v^* igual a la de la placa vibrante; todos los demás parámetros del movimiento son calculados directamente. Se puede notar que, a pesar de que el coeficiente de restitución no es cero, la sincronización con segundo armónico es bastante estable. Esto es porque el movimiento del objeto y de la placa vibrante entonces toman lugar en la misma dirección, minimizando la diferencia de velocidades y reduciendo la probabilidad de rebote. Puede haber sincronización con otras frecuencias (véase la figura (1.4)).

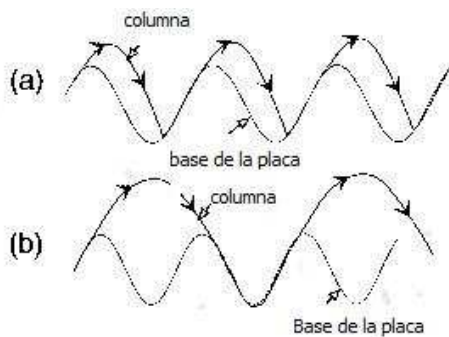


Figura 1.4: Sincronización

Como se habrá notado en la discusión anterior de una columna de un número suficientemente grande de partículas, la energía en la colisión se disipa por que las colisiones propagan dicha energía sobre la red de partículas cuando las interacciones no son puramente elásticas. Si esto es así, puede suceder que sea imposible llegar a un estado de fluidización y entonces el sistema se seguirá comportando como un bloque.

El parámetro que controla este efecto es reducido a una variable definida por

$$X = N(1 - \epsilon). \quad (1.34)$$

Existe un valor crítico X_c para X de forma que $X_c = \phi$. Los cálculos en ([6]) muestran de una forma un poco más clara el orden de magnitud de la variable reducida X . El coeficiente de restitución ε para el aluminio es 0.6 para el acero endurecido 0.92. Se encuentra que el número crítico de partículas es de 8 para el aluminio y 39 para el acero, con unas pocas excepciones, los materiales que se manejan en la industria alimenticia y farmacéutica tienen coeficientes de restitución mucho menores. Por lo tanto, en la mayoría de las situaciones prácticas, la variable X es tal que $X \gg 3$, y los materiales están más a menudo en un régimen condensado.

1. Caso $X \leq 3$: existe una posible transición de un estado condensado prevaleciendo durante aceleraciones débiles a un estado fluidizado cuando la aceleración se incrementa.
2. Caso $X \geq 3$ En este caso se tiene una columna alta del material en la cual la disipación de energía es bastante sustancial. La columna actúa como un bloque uniforme y la duración de los choques entre las partículas puede llegar a ser muy grande comparado con el periodo de vibración. Hablando estrictamente tampoco se está en un estado condensado ya que el número de colisiones tiende a cero.

Resumiendo lo que se conoce en este punto, una columna de partículas excitadas por una vibración vertical puede mantener al medio en un estado condensado por tres diferentes razones las cuales pueden ser indicio de una cantidad insuficiente de energía impartida a la columna. Las tres causas que han sido identificadas son:

1. El coeficiente efectivo de restitución elástico es muy bajo. Esto sucede cuando las partículas están agrupadas y la mayor parte de la energía colisional es disipada en un gran número de impactos.
2. La energía colisional es disipada en la columna como resultado de que los procesos de colisión son inherentemente disipativos, o la columna es alta. En ambos casos, la excitación no puede ser transmitida a la parte alta de la columna.
3. El vuelo balístico de una columna completa sobre uno de los armónicos del periodo de excitación, en forma tal que las velocidades de la columna y de la placa vibrante están aproximadamente sincronizadas. En este caso, las colisiones son virtualmente eliminadas y la energía elástica no es transmitida.

El fenómeno de la condensación de las partículas no es exclusivo de sistemas unidimensionales o bidimensionales. Este puede ser observado generalmente en una colección de partículas experimentando colisiones múltiples. La tendencia hacia la condensación se puede entender sobre la base de la siguiente cadena de eventos simples: cuando dos partículas se unen, el bloque resultante tiene

un coeficiente de restitución elástico más bajo que la partícula tomada individualmente. Como resultado, es más probable que el bloque capture una tercera partícula durante una colisión, creando un bloque más grande con un coeficiente de restitución más pequeño, y así en adelante. La probabilidad de que una partícula sea capturada por un bloque preexistente es aproximadamente proporcional al área de la superficie del bloque. Por lo tanto, los bloques grandes tienen mayor probabilidad de crecer que los bloques pequeños. Este fenómeno es similar a lo que pasa durante la nucleación de gotitas líquidas sobre una superficie.

1.6. Una sola partícula sobre la superficie de un medio granular

Hasta ahora se han considerado primero la interacción entre dos partículas, luego una cadena de partículas de la misma especie, el siguiente paso es considerar un medio formado por partículas de distintas especies; esto con el fin de introducir las leyes que a menudo son derivadas de la mecánica de medios continuos, de la misma forma que en la teoría cinética para los fluidos se llega a las ecuaciones de Navier-Stokes. Así pues el siguiente paso lógico es considerar el caso de una sola partícula interactuando con un medio granular, el cual se supondrá rígido.

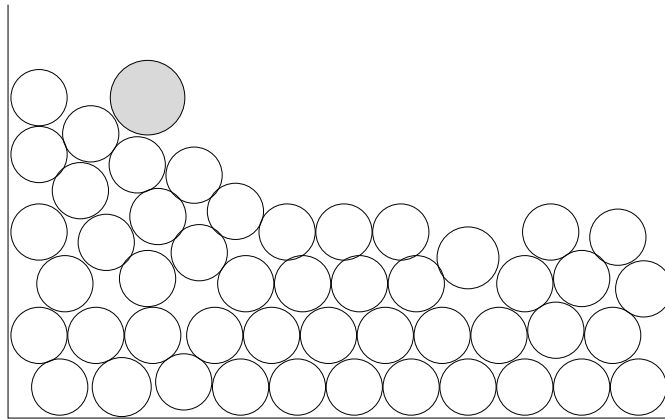


Figura 1.5: Un solo intruso en la superficie de un medio granular

Consideremos un sistema como el representado en la figura (1.5), podemos esperar que tal partícula caiga hacia abajo como consecuencia de una pendiente desigual, cuyas prominencias son aproximadamente del mismo tamaño que la partícula misma, siguiendo un camino irregular y complejo el cual depende de los contactos a los que la partícula este sometida. Se puede predecir que este camino está formado de parábolas y secciones de curvas siguiendo el contorno

del soporte, dependiendo de las condiciones mecánicas de los materiales en contacto. Además se puede predecir que la trayectoria dependerá de alguna forma compleja de la rapidez de la partícula. Bajo tales condiciones ¿es posible escribir una ecuación global que describa, cuando menos de forma aproximada, todos estos posibles comportamientos?

En este punto, es útil revisar la Segunda ley de Newton, la cual describe la caída de la partícula de masa m y diámetro D hacia abajo de una pendiente que hace un ángulo θ con el plano horizontal. La partícula interactúa con su medio ambiente (las partículas debajo de ella y el aire sobre de ella) a través de la fuerza de arrastre F análoga a la fuerza de fricción. En este punto podemos introducir la aceleración normalizada Γ . Este número adimensional es igual a A/g , donde A es la aceleración experimentada por la partícula y g es la aceleración debida a la gravedad. Entonces la ley de Newton se puede escribir en la forma:

$$\Gamma = \sin(\theta) - \frac{F}{mg} \quad (1.35)$$

Un movimiento uniforme resulta cuando $\Gamma = 0$, es decir, cuando la fricción equilibra la atracción gravitacional. El caso idealizado anterior ayuda a comprender que la fuerza de fricción corresponde a la pérdida de la energía cuando la partícula baja por la pendiente. Esto permite escribir $F = \frac{\partial E}{\partial x}$, donde x corresponde a la distancia cubierta. La energía de la partícula de masa m tiene dos componentes:

Su energía cinética E_k , la cual es disipada sobre una distancia característica λ como un resultado de las colisiones sucesivas y la fricción con el soporte.

Su energía potencial E_p , la cual también decrece cuando la partícula cae hacia abajo en una sucesión de alturas D .

Así se puede escribir

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 \quad (1.36)$$

y

$$E_p = mgh \cos(\theta), \quad (1.37)$$

donde h es la altura de la partícula. Si se considera que la pérdida de la energía cinética ocurre sobre la longitud característica λ , se obtiene la primera componente de la fuerza de fricción $F_k = \frac{1}{2\lambda}mv^2$. Para derivar una expresión aceptable para la segunda componente F_p , correspondiente a la pérdida de energía potencial, se usará el siguiente argumento:

A altas velocidades, la partícula moviéndose libremente ejecuta vuelos balísticos cuyos rangos típicos son del orden de d (diámetro de las partículas). Este rango puede ser estimado independientemente considerando los vuelos balísticos de altura $\Delta h \approx (\frac{1}{2}gT^2)$, donde T es el tiempo típico de vuelo libre de la partícula moviéndose a una velocidad v . En esta aproximación, la cantidad vT corresponde a una distancia típica del orden de d . Bajo estas condiciones, tenemos $T \sim d/v$, y la fuerza de fricción equivalente a la pérdida de energía

potencial se puede escribir en la forma

$$F_p = \frac{mg\Delta h}{d} \sim \frac{1}{2}mg^2 \frac{d}{v^2}. \quad (1.38)$$

Esta ecuación sugiere que la fuerza disipativa correspondiente llega a ser menos y menos efectiva cuando la rapidez de la partícula se incrementa.

A baja velocidad, la trayectoria de la partícula sigue el perfil de la superficie del soporte granular. La pérdida resultante de energía potencial no depende fuertemente de la velocidad. Ésta corresponde sólo a la fricción seca experimentada por la partícula cuando ésta se mueve sobre la superficie, en este caso se tiene

$$F_p = mg. \quad (1.39)$$

A una velocidad intermedia, simplemente se interpola entre los dos extremos con una ecuación de la forma

$$F_p \sim mg \frac{1}{1 + \beta(v^2/gd)}, \quad (1.40)$$

donde β es tratado como un parámetro ajustable. Esta expresión heurística converge hacia los límites correspondientes cuando $v \rightarrow 0$ y $v \rightarrow \infty$

Como paso final se escriben ambas componentes juntas en una sola expresión de la forma

$$F = F_p + F_c = mg \left[\frac{a}{1 + b(v^2/gd)} + c \left(\frac{v^2}{gd} \right) \right], \quad (1.41)$$

donde a , b y c son constantes adimensionales.

1.7. Competencia entre percolación y condensación

Antes de terminar este capítulo y ya que existe cierta familiaridad con el fenómeno de condensación en un medio granular, es factible revisar cómo influye ésta en el fenómeno de segregación.

Como ya se dijo, existe una temperatura crítica, T_C , abajo de la cual un sistema monodisperso de esferas duras sufre una transición a la condensación en la presencia del campo gravitacional. Considere un sistema de esferas duras con masa m y diámetro d en un contenedor. Sea μ el ancho inicial de la capa medida en unidades de d . Si el sistema está en contacto con un reservorio térmico a una temperatura T , uno puede calcular el ancho adimensional de la capa fluidizada, Δh , en un espacio de dimensión D , se tiene la ecuación $m\langle v^2 \rangle / 2 = DT / 2 \sim mgd\Delta h$, la cual produce $\Delta h \approx DT / (2mgd)$. Uno puede estimar el punto T_C en el cual el sistema está completamente fluidizado, haciendo $\Delta h \approx \mu$. Se obtiene

$$T_C = \frac{mgd\mu}{\mu_0}, \quad (1.42)$$

donde μ_0 es una constante que depende de la dimensión espacial y la estructura fundamental de empacamiento, μ_0 es determinada con el uso de la presión de Enskog ([18]).

Cuando $T > T_c$, el sistema está completamente fluidizado y el ancho adimensional del sólido granular, definido como $h_{solid} = \mu - \Delta h(T)$, se anula. Por otro lado, para $T < T_c$, se encuentra que $h_{solid} \neq 0$, ya que una fracción de partículas se condensa en el fondo. Aquí la fase sólida se refiere a un estado de esferas duras donde cada partícula fluctúa alrededor de un punto fijo, pero está confinada en una región por lo que no puede intercambiar la posición de su centro de masa con partículas vecinas.

Considérese ahora una mezcla binaria de esferas duras con especies A y B que tienen masa m_A y m_B y radios r_A y r_B respectivamente, y el ancho inicial de las capas son μ_A y μ_B respectivamente. De la ecuación (1.42), se encuentra que la razón crítica de temperaturas está dada por

$$\frac{T_c(A)}{T_c(B)} = \frac{m_A d_A}{m_B d_B}, \quad (1.43)$$

donde se ha supuesto $\mu_A = \mu_B$. Supóngase que el sistema se encuentra a una temperatura T entre las dos temperaturas críticas $T_c(A)$ y $T_c(B)$, es decir, $T_c(B) < T < T_c(A)$. Entonces, las esferas duras del tipo B están por abajo de la temperatura de condensación, mientras que las del tipo A están por debajo de ésta. Así a temperatura T , las partículas de la clase A mantendrán un estado condensado, mientras que las del tipo B permanecerán en un estado fluidizado. Por lo tanto las partículas del tipo A se segregan hacia el fondo del contenedor. La suposición importante de este escenario es que las partículas del tipo A interactúan sólo con partículas de su misma especie mientras que las partículas del tipo B son vistas como fantasmas. Aún cuando esta suposición es poco común, se encuentra que la predicción basada sobre esta suposición funciona bien para la segregación de mezclas binarias bajo la influencia de la gravedad.

Como la temperatura crítica depende de m y d , una inversión de la segregación puede ser alcanzada alterando simplemente los valores de los parámetros m y d .

La simulación hecha en ([13]) sugiere que durante el proceso de segregación, tanto el proceso de condensación como el de percolación compiten. Así la condición para pasar de efecto de la nuez de Brasil al efecto inverso puede ser determinada haciendo los parámetros de control para ambos casos del mismo orden de magnitud.

El parámetro de control importante para el mecanismo de percolación es la razón de los diámetros de los dos tipos de partículas, mientras que, como ya se ha establecido, para el mecanismo de condensación es la razón de las dos temperaturas críticas, entonces si se quiere determinar la condición de transición, se tiene que:

$$\left(\frac{d_A}{d_B}\right)^D \approx \frac{T_c(A)}{T_c(B)} = \frac{m_A d_A}{m_B d_B}, \quad (1.44)$$

o equivalentemente,

$$\left(\frac{d_A}{d_B}\right)^{D-1} \approx \frac{m_A}{m_B}, \quad (1.45)$$

donde D es la dimensión espacial. En particular para un sistema bidimensional

$$\left(\frac{d_A}{d_B}\right) \approx \frac{m_A}{m_B}. \quad (1.46)$$

Esto da un criterio, que será útil en el capítulo 4 para la transición entre el efecto de la nuez de Brasil y el efecto inverso.

Capítulo 2

Modelos de medios granulares

Existen básicamente dos enfoques cuando se desean modelar problemas referentes a los medios granulares, por un lado se puede considerar al medio granular como un medio continuo, en cuyo caso se utiliza la descripción hidrodinámica, y por otro lado se puede considerar al medio granular como un conjunto de partículas, en el cual se utiliza la teoría de ensambles de la mecánica estadística clásica. En este capítulo se revisarán algunos aspectos de ambos enfoques.

2.1. Un enfoque estadístico del problema

En principio se pueden escribir las ecuaciones de movimiento para cada una de las partículas. Sin embargo, en la mayoría de los casos es muy difícil resolver el sistema de ecuaciones resultante y lo que se hace es utilizar un enfoque estadístico.

Dentro de una mezcla granular agitada, todas las partículas están sometidas a un potencial de interacción, debido a los choques entre ellas. Las propiedades de transporte de una mezcla, tales como la viscosidad, dependen directamente de las colisiones entre las partículas, es decir, la ley de fuerza que gobierna a estas colisiones. Por ejemplo, en los tratamientos elementales de las propiedades de transporte, se emplea la trayectoria libre media, la cual depende de la sección transversal de la colisión ([22]).

La segunda forma de estudiar lo referente al potencial de interacción entre las partículas es a partir de la ecuación de estado, estudiando las desviaciones respecto a la ecuación de estado del gas ideal, $PV = NkT$. Se puede utilizar este método, ya que se puede considerar a las mezclas granulares como un gas imperfecto, es decir, generalizaremos el tratamiento del gas perfecto, antes de ir sobre el modelo hidrodinámico. Como se puede inferir de este tratamiento, no es posible asignarle una energía a cada partícula de forma individual, debido a que, cada una de ellas interactúa con las demás.

Partiendo del modelo estadístico, para ello es necesario obtener la función de partición para la mezcla granular. Recordando que el gas real se puede escribir como un gas sujeto a interacciones, entonces la función de partición Z_p para el gas real tiene la forma:

$$Z_p = Z_p(T, V, N) = \frac{1}{N!} \left(\int_0^\infty \frac{4\pi V p^2}{h^3} e^{-\beta p^2/2m} d\mathbf{p} \right)^N (Z_{int}(T))^N, \quad (2.1)$$

donde h representa un constante cuyas dimensiones son de acción, Z_{int} representa el término debido a las interacciones entre las partículas que forman el medio, $\beta = \frac{1}{kT}$ y \mathbf{p} representa el momento.

Escribiendo

$$V = \int d^3\mathbf{r} \quad (2.2)$$

y

$$4\pi p^2 dp = \int_p^{p+dp} d^3\mathbf{p}, \quad (2.3)$$

y sustituyendo en (2.1) se obtiene

$$Z_p = \frac{1}{N!} \left(\int_0^\infty \frac{d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}}{h^3} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \right)^N (Z_{int}(T))^N. \quad (2.4)$$

Esto último encuentra justificación en el hecho de que estamos hablando del volumen que corresponde al espacio fase

$$d\Gamma = \int_V \int_p^{p+dp} d\mathbf{p} = V \int_p^{p+dp} d\mathbf{p} = 4\pi p^2 V dp. \quad (2.5)$$

Como se puede ver de la ecuación (2.1) se tienen que calcular $2N$ integrales. Además se puede ver que la función de partición se divide en dos partes

$$Z_1^{tr} = Z^{tr}(T, V, 1) = \frac{1}{N!} \left(\int_0^\infty \frac{4\pi V p^2 dp}{h^3} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \right) = \sum_\alpha e^{-\beta \epsilon_\alpha^{tr}} \quad (2.6)$$

que es la función de partición debida al movimiento traslacional de las partículas, aquí \sum_α denota la suma sobre todos los estados traslacionales de los granos, y

$$Z_{int} = \sum_\alpha e^{-\beta \epsilon_\alpha^{int}} \quad (2.7)$$

es la función de partición interna de un grano, donde \sum_α denota la suma sobre todos los estados de movimiento interno, rotaciones y vibraciones del grano.

Las variables de integración en cada uno de los N factores de la ecuación (2.1) se denominan de manera diferente, $r_1, \dots, r_N, p_1, \dots, p_N$ y recordando que

$$e^{A+B} = e^A e^B \quad (2.8)$$

Podemos escribir (2.1) en la forma

$$Z_p = \frac{1}{N!} \int \frac{1}{h^{3N}} d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N e^{-\beta k} (Z_{int}(T))^N \quad (2.9)$$

donde

$$k = \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 + \dots + \mathbf{p}_N^2) \quad (2.10)$$

es la energía traslacional del gas, cuando los granos poseen los momentos p_1, p_2, \dots, p_N .

Hasta aquí sólo hemos considerado al medio como un gas ideal, ya que no hemos aún trabajado con Z_{int} , es decir, cuando los granos no interactúan entre ellos. Intentemos generalizar al caso donde existen interacciones entre los granos. Para ello consideremos los siguientes puntos:

(i) Interpretemos

$$\frac{1}{h^{3N}} d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N \quad (2.11)$$

como el número de estados que puede tomar el grano 1, en un elemento de volumen d^3r_1 en r_1 y con momento $d^3\mathbf{p}_1$ en \mathbf{p}_1 , de modo semejante para los granos 2, 3, ..., N , el volumen aquí considerado debe ser de tal tamaño que contenga al menos un par de granos interactuando.

(ii) El factor $\frac{1}{N!}$, denota el hecho de que los granos que componen el gas, en realidad no pueden marcarse como 1, 2, ..., N .

(iii) La función de partición interna sólo depende de las propiedades internas de cada grano.

(iv) La exponencial $e^{-\beta k}$ es el factor de Boltzmann asociado con la energía cinética traslacional total K del gas.

Para el medio granular, al cual podemos considerar como un gas real, las características (i) a (iii) no se alteran. Las características (ii) y (iii), se siguen directamente del hecho de que en esta formulación, es independiente de las interacciones entre las partículas, debido a que el (ii) es un hecho puramente estadístico. Para (i), hay que demostrar que la densidad de estados,

$$\frac{1}{h^3} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} \quad (2.12)$$

para partículas independientes, también es válida para partículas que interactúan. Por otra, (iv) debe modificarse; debido a que el factor de Boltzmann en la función de partición para el gas ideal es

$$e^{-\beta K} \quad (2.13)$$

pero eso se debe al hecho de que en el gas real no existen potenciales de interacción, si consideramos que tales potenciales existen, entonces la función de partición tiene la forma

$$e^{-\beta H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)} \quad (2.14)$$

donde

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) = K + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.15)$$

es la suma de la energía cinética traslacional y de la energía potencial U debida a las partículas que interactúan entre sí. U sólo depende de las coordenadas de posición de las partículas $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$, mientras que K sólo de sus momentos $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N$.

Luego entonces, podemos ver que la función de partición $Z(T, V, N)$ se puede obtener a partir de la del gas perfecto, reemplazando el factor de Boltzmann dado en (2.13) por el dado en (2.14), y así la ecuación (2.1) queda expresada en la forma

$$Z = Z(T, V, N) = \frac{1}{N!} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N e^{-\beta H(Z_{int}(T))} \quad (2.16)$$

Ahora bien H es la suma de dos términos: K , que sólo depende de los momentos, y U que sólo depende de las coordenadas de posición. De aquí podemos factorizar esta integral de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{N!} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N e^{-\beta K(Z_{int}(T))} \times \int e^{-\beta U} d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N \\ &= Z_p \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N e^{-\beta U} \\ &= Z_p Q_N(T, V) \end{aligned} \quad (2.17)$$

donde Z_p es la función de partición de un gas perfecto y

$$Q_N = Q_N(T, V) = \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N e^{-\beta U} \quad (2.18)$$

se conoce como la función de partición configuracional del gas.

Supongamos que la energía potencial U del gas es el resultado de los potenciales entre los pares de partículas. Si se denota esta energía potencial entre la partícula i y la partícula j , cuando se encuentran separadas una distancia $\mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ por $u_{ij} = u(\mathbf{r}_{ij})$ entonces se puede escribir la energía potencial U del gas de N partículas como:

$$U = \sum u_{ij} \quad (2.19)$$

donde la suma es sobre todas las parejas de partículas. Sustituyendo la ecuación (2.19) en la ecuación (2.18), se obtiene

$$Q_N = \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N e^{-\beta \sum u_{ij}} = \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \prod e^{-\beta u_{ij}} \quad (2.20)$$

donde el producto es sobre todas las parejas de partículas (con $i < j$).

Con el fin de calcular la integral (2.20) es necesario introducir en lugar de las exponenciales que contienen λ_{ij} , las nuevas cantidades

$$\lambda_{ij} = \lambda(\mathbf{r}_{ij}) = e^{-\beta u_{ij}} - 1 \quad (2.21)$$

de modo que la ecuación (2.20) queda

$$\begin{aligned} Q_N &= \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Pi(1 + \lambda_{ij}) \\ &= \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N [1 + \Sigma\lambda_{ij} + \Sigma\lambda_{ij}\lambda_{kl} + \dots] \end{aligned} \quad (2.22)$$

donde los términos sucesivos entre corchetes surgen de la siguiente manera, eligiendo términos de

$$\Pi(1 + \lambda_{ij}) = (1 + \lambda_{12})(1 + \lambda_{13}) \dots (1 + \lambda_{N-1,N}) \quad (2.23)$$

el primer término (2.19) resulta de tomar el 1 de cada factor $(1 + \lambda_{ij})$. El segundo término $(\Sigma\lambda_{ij})$ resulta de tomar, en todas las formas posibles, un factor λ_{ij} y unos de todos los demás factores $(1 + \lambda_{ij})$, el tercer término $(\Sigma\lambda_{ij}\lambda_{kl})$ resulta de tomar en todas las formas posibles, dos factores λ_{ij} , λ_{kl} y unos de todos los demás factores $(1 + \lambda_{rs})$; y así sucesivamente. Así la sustitución (2.21) reemplaza la integral múltiple (2.20), cuyo integrando es un producto de muchos factores, por una suma de integrales múltiples. Excepto las dos primeras, estas integrales aún son muy difíciles de calcular. Sin embargo, la ec. (2.22) permite un considerable tratamiento analítico. En ella los términos sucesivos poseen una interpretación física sencilla la cual se refiere a las desviaciones respecto al comportamiento de un gas ideal, a medida que se incrementa la densidad del gas.

Ahora estudiemos esta interpretación y luego consideraremos en detalle los dos primeros términos de dicha integral.

El significado de los diversos términos que aparecen en la ec. (2.22) se deduce de manera que

$$\lambda(r) = e^{-\beta u(r)} - 1 \quad (2.24)$$

depende de r . Para el potencial entre partículas $u(r)$, $\lambda(r)$ difieren notablemente de cero únicamente para valores pequeños de la separación entre partículas, por ejemplo $r \leq 2r_0$, donde r_0 es del orden del radio de la partícula. Por tanto, λ_{12} es esencialmente cero, a menos que las partículas 1 y 2 estén muy próximas, esto es, estén chocando. De modo semejante, $\lambda_{12}\lambda_{34}$ únicamente es diferente de cero en colisiones simultáneas de 1 con 2 y de 3 con 4. Pero un término tal como $\lambda_{12}\lambda_{23}$ es diferente de cero si las partículas 1, 2 y 3 están próximas simultáneamente; es decir que este término representa una triple colisión entre las tres partículas. Interpretaciones semejantes se dan a los triples productos, etc. Por lo tanto los diversos términos de la ec. (2.22) representan cúmulos de partículas que interactúan. Las diversas integrales múltiples se conocen como integrales de cúmulo y la serie (2.22) se llama desarrollo en cúmulos. Sólo se considerarán los dos primeros términos de este desarrollo.

Si en el desarrollo (2.22) se desprecian todos, excepto el primer término (1) o sea si se desprecian todas las colisiones, entonces la ec. (2.22) se reduce a $Q_N = 1$, que como se puede ver es la aproximación del gas perfecto.

Consideremos ahora el segundo término $(\Sigma\lambda_{ij})$ de la ec. (2.22). En total, se tienen $\frac{1}{2}N(N-1)$ de tales términos en la suma $\Sigma\lambda_{ij}$ correspondientes al

número de maneras de seleccionar parejas de partículas. Por supuesto todos estos términos son iguales, ya que sólo difieren en la manera en que se denominan las variables de integración. Por consiguiente, este término de la ec. (2.22) se puede escribir en la forma:

$$\frac{1}{V^N} \frac{N(N-1)}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N [e^{-\beta u(r_{12})} - 1] \quad (2.25)$$

Integrando con respecto a $\mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N$, sobre un volumen de gas, da un factor V_{N-2} .

Para las integraciones restantes sobre \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , se introducen las nuevas variables de integración:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2). \quad (2.26)$$

La integración respecto a \mathbf{R} da un factor V más y la expresión (2.25) queda:

$$\frac{N^2}{2V} \int [e^{-\beta u(r)} - 1] d^3\mathbf{r} = \frac{N^2}{2V} I_2 \quad (2.27)$$

donde también se reemplazó $N(N-1)$ por N^2 , puesto que $N \gg 1$ y se introdujo la abreviatura I_2 para la integral dada en (2.27).

Empleando estos resultados, puede escribirse la función de partición configuracional del gas (2.22) como:

$$Q_N = \left\{ 1 + N \left(\frac{N}{2V} I_2 \right) + \dots \right\}. \quad (2.28)$$

La integral de I_2 , es del orden de magnitud del volumen ν_0 de un grano, ya que el integrando difiere apreciablemente de cero sólo dentro de ese volumen y, allí, es del orden de la unidad, de aquí, que el factor $\frac{N}{2V} I_2$ que aparece en la ec. (2.28) es independiente de N , esto es, del tamaño del sistema; es una cantidad intensiva.

Ahora bien, se sabe que la energía libre de Helmholtz es una cantidad extensiva. De su relación logarítmica con la función de partición, se deduce que esta última debe depender de N , como la N -ésima potencia de alguna cantidad intensiva. Puesto que $Z = Z_P Q_N$, se concluye que por sí misma, Q_N debe ser la N -ésima potencia de alguna cantidad intensiva. Si esta última expresión para Q_N debe ser idéntica a la ec. (2.28), entonces debe tener la forma:

$$Q_N = \left(1 + \frac{N}{2V} I_2 + \dots \right)^N \quad (2.29)$$

donde los últimos términos, indicados por medio de \dots , también deben ser intensivos.

Para un gas a baja densidad, puede aproximarse la ec. (2.29) por

$$Q_N = \left(1 + \frac{N}{2V} I_2 \right)^N. \quad (2.30)$$

Esta es la expresión final para la función de partición configuracional. A partir de ella, se deduce el principio de las desviaciones respecto del comportamiento del gas sin interacciones, a bajas densidades. Para verlo se introduce la energía libre de Helmholtz $F = -kT \ln Z$. De $Z = Z_P Q_N$ y de la ec. (2.30), se obtiene:

$$F = F_p - kTN \ln\left(1 + \frac{N}{2V} I_2\right) = F_p - kT \frac{N^2}{2V} I_2 \quad (2.31)$$

donde se aproximó $\ln\left(1 + \frac{N}{2V} I_2\right)$ por $\frac{N}{2V} I_2$, lo cual se puede hacer, ya que la última razón es pequeña, y se introdujo la energía libre de Helmholtz del gas perfecto $F_p = -kT \ln Z_p$.

La ecuación de estado para el gas se calcula mediante:

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V}. \quad (2.32)$$

El primer término de (F_p) en la ec. (2.30) conduce a la ecuación del gas ideal. El segundo término da las desviaciones para un gas real a baja densidad. Directamente se obtiene:

$$P = \frac{NkT}{V} \left[1 - N \frac{I_2}{2V}\right]. \quad (2.33)$$

El término de corrección es del orden de $N \frac{I_2}{2V}$; cuando este término es pequeño, el gas se comporta como un gas perfecto.

La ec. (2.33) es el principio del desarrollo virial, el cual es una representación de la ecuación de estado, como una serie de potencias en $\frac{N I_2}{2V}$. Los términos de orden superior del desarrollo virial son resultados de los términos en Q_N , ec. (2.28). Escribiendo el desarrollo virial como:

$$P = \frac{NkT}{V} \left[1 + \frac{N}{V} B(T) + \left(\frac{N}{V}\right)^2 C(T) + \dots\right] \quad (2.34)$$

se ve que el segundo coeficiente virial $B(T)$ está relacionado con la integral de cúmulo I_2 por las ecuaciones (2.33) y (2.27), a través de:

$$B(T) = -\frac{I_2}{2} = \frac{1}{2} \int (1 - e^{-\beta u(r)}) d^3 \mathbf{r} \quad (2.35)$$

Ahora pues, hay que encontrar al menos el segundo coeficiente del virial para poder caracterizar nuestra mezcla granular.

Para calcular el segundo coeficiente virial, suponemos que el potencial de interacción sólo depende de la distancia entre las partículas, luego entonces se calculan las integrales angulares que aparecen en la ec. (2.35), puesto que el integrando sólo depende de r . Se obtiene:

$$B(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 (1 - e^{-\beta u(r)}) dr \quad (2.36)$$

Entonces

$$B(T) = \frac{2\pi}{3}(2r_0)^3 + \frac{2\pi}{kT} \int_{2r_0}^{\infty} r^2 u(r) dr = b - \frac{a}{kT} \quad (2.37)$$

donde la constante positiva a se define por:

$$a = -2\pi \int_{2r_0}^{\infty} r^2 u(r) dr \quad (2.38)$$

y la constante b se define por

$$b = 4\left(\frac{4\pi r_0^3}{3}\right) = 4v_0. \quad (2.39)$$

Se sustituye la ec. (2.37) para $B(T)$ en el desarrollo virial (2.34), eliminando los coeficientes viriales tercero y superiores, $C(T), \dots$. La ecuación de estado resultante es:

$$P = \frac{NkT}{V} \left[1 + \frac{N}{V} \left(b - \frac{a}{kT} \right) \right]. \quad (2.40)$$

Dicha ecuación será utilizada como una primera aproximación para la ecuación de estado para un medio granular cuyas deformaciones son pequeñas.

2.2. Modelo hidrodinámico del medio granular

En esta sección partiremos de la ecuación de Boltzmann con el fin de obtener las ecuaciones que describen el comportamiento del medio granular, si este se considera como un fluido, es decir, se supondrá que un material granular es un medio continuo. La mayor parte del tratamiento aquí presentado puede ser encontrado en ([2])

La ecuación de Boltzmann es

$$\frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \iint \mathbf{g} \sigma [\mathbf{f}'_1 \mathbf{f}' - \mathbf{f}_1 \mathbf{f}] d\mathbf{v} d\Omega \quad (2.41)$$

donde: f es la función de distribución de una sola partícula, ∇ es un gradiente con respecto a la coordenada \mathbf{r} y a la integral del segundo miembro se le conoce como el operador de colisión, el cual describe las colisiones del sistema.

La función de distribución de una sola partícula en el punto \mathbf{r} y tiempo t , $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ se define como la densidad de número de partículas que tienen la velocidad \mathbf{v} en (\mathbf{r}, t) . En otras palabras, $\frac{f}{n}$ es la densidad de probabilidad para que una partícula en (\mathbf{r}, t) tenga una velocidad \mathbf{v} . Similarmente uno puede definir la función de distribución de dos partículas $f_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$.

La densidad de número, el campo de velocidades \mathbf{V} , y la temperatura T , pueden ser expresados como promedios con respecto a la función de distribución:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{v}, \quad (2.42)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \mathbf{v} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{v}, \quad (2.43)$$

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{v}. \quad (2.44)$$

¿Por qué podemos esperar que una aproximación hidrodinámica sea correcta?

Primero hay que decir que una fase fluidizada del grano es conocida como un "gas granular", debido a que en todos los procesos de fluidización (por vibración, vaciado, rotación,...) los granos interactúan por medio de colisiones aproximadamente instantáneas, en una forma que nos recuerda a la imagen clásica del gas molecular. [12] Como los gases granulares exhiben propiedades de la mecánica de fluidos, uno esperaría que ellos obedecieran las ecuaciones hidrodinámicas.

En el mundo de los fluidos moleculares los campos hidrodinámicos son densidades de cantidades conservadas, tales como, masa, momento y energía.

Ahora consideremos la función de distribución sin considerar cómo podemos obtener cantidades macroscópicas de ésta.

La ec. (2.43) también puede escribirse como

$$n\mathbf{V} = \int \mathbf{v} f d\mathbf{v}, \quad (2.45)$$

o, usando componentes

$$nV_i = \int v_i f d\mathbf{v}. \quad (2.46)$$

Aquí y en lo que sigue, a menos que se establezca otra cosa, los subíndices latinos tomarán los valores 1,2,3.

La velocidad de masa \mathbf{V} es lo que podemos percibir macroscópicamente del movimiento de las partículas; ésta es cero para un gas granular en equilibrio en un contenedor en reposo. Cada una de las partículas tiene su propia velocidad \mathbf{v} la cual puede ser descompuesta en la suma de \mathbf{V} y otra velocidad:

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{V} \quad (2.47)$$

la cual describe la desviación aleatoria de la velocidad de cada partícula del movimiento del conjunto con velocidad \mathbf{V} . La velocidad \mathbf{c} es usualmente llamada la velocidad peculiar o la velocidad aleatoria; esta coincide con \mathbf{v} cuando el gas está macroscópicamente en equilibrio. Notemos que de las ecuaciones (2.47), (2.46) y (2.42) tenemos

$$\int c_i f d\mathbf{v} = \int v_i f d\mathbf{v} - v_i \int f d\mathbf{v} = nv_i - v_i n = 0. \quad (2.48)$$

La cantidad nv_i que aparece en la ecuación (2.46) puede ser interpretada como la densidad de momento o, alternativamente, como el flujo de masa (en la dirección i). Otras cantidades que serán necesarias más adelante son el flujo de

momento, la densidad de energía, y el flujo de energía. Ya que el momento es una cantidad vectorial, tenemos que considerar el flujo de la componente j de momento en la dirección i ; esto está dado por

$$\int v_i(v_j f) d\mathbf{v} = \int v_i v_j f d\mathbf{v}, \quad (2.49)$$

donde $v_j f$ es la densidad de momento en el espacio fase. La ecuación (2.49) muestra que el flujo de momento está descrito por un tensor simétrico de segundo orden. Entonces es de esperar que en la descripción macroscópica sólo parte del flujo de momento evaluado macroscópicamente será identificado como tal, a causa de que la integral en la ec. (2.49) es en general diferente de cero aún si el gas está macroscópicamente en reposo. Para encontrar cómo el flujo de momento aparece en la descripción macroscópica, se usará el hecho de que la velocidad \mathbf{v} puede dividirse en dos partes de acuerdo con la ec. (2.47), entonces de acuerdo con las ecuaciones (2.43) y (2.48) se tiene que:

$$\begin{aligned} \int v_i v_j d\mathbf{v} &= \int (V_i + c_i)(V_j + c_j) f d\mathbf{v} \\ &= V_i V_j \int f d\mathbf{v} + \mathbf{V}_i \int \mathbf{c}_j f d\mathbf{v} + \mathbf{V}_j \int \mathbf{c}_i f d\mathbf{v} + \int \mathbf{c}_i \mathbf{c}_j f d\mathbf{v} \\ &= n v_i v_j + \int c_i c_j f d\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Por consiguiente, el flujo de momento se descompone en dos partes, una de las cuales es reconocida como el flujo macroscópico de momento, mientras que la segunda parte es un flujo de momento debido al movimiento aleatorio del medio granular ¿Cómo se manifestará esta segunda parte en una descripción macroscópica? Si tomamos una región fija del gas granular y observamos el cambio en el momento dentro de éste, encontraremos que, en la ausencia de fuerzas externas, los cambios pueden ser sólo atribuidos a la materia que entra y deja la región, dejando una segunda parte que no tiene explicación macroscópica a menos que admitamos que las regiones contiguas del gas ejercen una fuerza sobre la región de interés, la cual está sujeta a tensión. Por consiguiente identificaremos la segunda parte del flujo de momento con el tensor de tensiones

$$p_{ij} = \int c_i c_j f d\mathbf{v}. \quad (2.51)$$

Aplicamos una descomposición análoga en la densidad y flujo de energía, nos da la densidad de energía como:

$$\frac{1}{2} \int \mathbf{v}^2 f d\mathbf{v} \quad (2.52)$$

y tomamos sólo $j = i$ sumando desde $i = 1$ hasta $i = 3$ en la ecuación (2.50), se obtiene

$$\frac{1}{2} \int \mathbf{v}^2 f d\mathbf{v} = \frac{1}{2} n \mathbf{v}^2 + \frac{1}{2} \int c^2 f d\mathbf{v}. \quad (2.53)$$

Una vez más el primer término en el lado derecho es identificado macroscópicamente como la densidad de energía cinética, mientras que el segundo término será identificado como la energía interna del gas. Por lo tanto, si se introduce la energía interna por unidad de masa e , tenemos

$$\rho e = \frac{1}{2} \int c^2 f d\mathbf{v} \quad (2.54)$$

ya que la densidad de energía interna es obviamente el producto de la energía interna por unidad de masa multiplicada por la densidad de masa. Se nota que existe una relación entre la densidad de energía interna y la traza del tensor de tensiones. De hecho, la ecuaciones (2.51) y (2.54) dan

$$p_{ii} = \int c^2 f d\mathbf{v} = \mathbf{2ne}. \quad (2.55)$$

Aquí se está usando la convención de suma sobre los índices repetidos desde 1 hasta 3. La traza dividida por tres da la parte isotrópica del tensor de tensiones, por lo cual es conveniente identificar $p = \frac{p_{ii}}{3}$ con la presión del gas, de la cual se sabe es isotrópica, al menos en el caso de equilibrio. Por lo tanto

$$p = \frac{2}{3} ne. \quad (2.56)$$

La ecuación (2.56) es llamada la ecuación de estado del gas y permite expresar cualquiera de las tres cantidades p, n, e en términos de las otras dos. Ya que la ecuación de estado macroscópico para un gas ideal es:

$$p = RnT \quad (2.57)$$

donde R es una constante y T es la temperatura del gas, de lo cual obtenemos que

$$e = \frac{3}{2} RT. \quad (2.58)$$

Ahora se investigará el flujo de energía; el flujo total de energía está dado por

$$\int v_i \left(\frac{1}{2} v^2 \right) f dv = \frac{1}{2} \int v_i v^2 f dv. \quad (2.59)$$

Usando la ecuación (2.47) se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int v_i v^2 f dv &= \frac{1}{2} \int (V_i + c_i)(V^2 + 2V_j c_j + c^2) f dv \\ &= \frac{1}{2} V_i V^2 \int f dv + \mathbf{V}_i \mathbf{V}_j \int \mathbf{c}_j f dv + \frac{1}{2} \mathbf{V}_i \int \mathbf{c}^2 f dv + \\ &+ \frac{1}{2} V^2 \int c_i f dv + \mathbf{V}_j \int \mathbf{c}_i \mathbf{c}_j f dv + \frac{1}{2} \int \mathbf{c}_i \mathbf{c}^2 f dv \end{aligned} \quad (2.60)$$

y usando las ecs. (2.42), (2.48), (2.51) y (2.54),

$$\frac{1}{2} \int v_i v^2 f dv = V_i \left(\frac{1}{2} n V^2 + ne \right) + V_j p_{ij} + \frac{1}{2} \int c_i c^2 f dv. \quad (2.61)$$

Ahora se tienen tres términos, el primero se debe al flujo de energía debido a la convección macroscópica, el segundo término es interpretado macroscópicamente como debido al trabajo hecho por las tensiones por unidad de tiempo. El tercer término es usualmente llamado el vector de flujo de calor, y es denotado por q_i :

$$q_i = \frac{1}{2} \int c_i c^2 f d\mathbf{v}. \quad (2.62)$$

Como para el caso del tensor de tensiones, la identificación es justificada, por el hecho que q_i juega el mismo papel que el vector de flujo de calor en las ecuaciones macroscópicas. Sin embargo, el nombre "flujo de calor" es algo engañoso, ya que existen situaciones cuando $q_i \neq 0$ y la temperatura es constante en cualquier zona; en este caso uno habla de un vector de flujo de calor constante lo cual suena un poco paradójico.

La discusión anterior conecta la función de distribución con las cantidades usadas en la descripción macroscópica; en particular, por ejemplo, p_{ij} puede usarse para calcular el arrastre sobre un cuerpo moviéndose dentro del gas, y q_i calcular la transferencia de calor de un cuerpo caliente a un cuerpo frío cuando dichos cuerpos están separados por una región ocupada por un gas. Para completar la conexión ahora se derivarán las cinco ecuaciones diferenciales, satisfechas por las cantidades macroscópicas consideradas anteriormente, como una consecuencia matemática de la ecuación de Boltzmann; estas ecuaciones son usualmente llamadas las ecuaciones de conservación, ya que ellas pueden ser interpretadas como expresiones para la conservación de la energía, momento y masa.

Para obtener estas ecuaciones, consideremos la ecuación de Boltzmann en la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x_i} + x_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = Q(f, f) \quad (2.63)$$

donde para mayor generalidad se ha introducido la fuerza de cuerpo, la cual es usualmente despreciada. Multiplicando ambos miembros de la ec. (2.63) por las cinco invariantes de colisión ψ_α ($\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$), las corresponden a las magnitudes que se conservan en la colisión, e integrando con respecto a \mathbf{v} , y recordando que :

$$\int \psi_\alpha Q(f, f) d\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (2.64)$$

para cualquier f . Por lo tanto, para cualquier f

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi_\alpha f d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \mathbf{v}_i \psi_\alpha f d\mathbf{v} + \mathbf{x}_i \int \psi_\alpha \frac{\partial f}{\partial v_i} d\mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (2.65)$$

Si tomamos sucesivamente $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$ y se usan las ecuaciones (2.42), (2.46), (2.50), (2.54), (2.61), y (2.62), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nV_i)}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial(nV_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (nV_i V_j + p_{ij}) &= nX_j \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[n(\frac{1}{2}V^2 + e)] + \frac{\partial}{\partial x_i}[nV_i(\frac{1}{2}V^2 + e) + p_{ij}V_j + q_i] = nX_jV_i \quad (2.66)$$

donde también se han usado las relaciones:

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial v_j} d\mathbf{v} &= 0 \\ \int v_j \frac{\partial f}{\partial v_j} d\mathbf{v} &= - \int \delta_{ij} f \mathbf{v} = -\mathbf{n}\delta_{ij} \\ \frac{1}{2} \int v^2 \frac{\partial f}{\partial v_j} d\mathbf{v} &= - \int v_j f d\mathbf{v} = -\mathbf{n}V_i \end{aligned} \quad (2.67)$$

lo cual se sigue de integrar por partes y del uso de las condiciones $\lim_{v \rightarrow \infty}(\psi_\alpha f) = 0$ la cual es requerida para que todas las integrales consideradas existan. En todas las integrales δ_{ij} es la delta de Kronecker, la cual es igual a 1 para $i = j$ y 0 para $i \neq j$. Las ecs. (2.66) son las ecuaciones básicas de la dinámica macroscópica del gas; sin embargo, constituyen en esquema vacío, ya que tenemos cinco ecuaciones para trece incógnitas. Para que las ecuaciones resulten útiles, se deben encontrar las expresiones para p_{ij} y q_i en términos de n , V_i y e . En otro caso se tendría que resolver directamente la ecuación de Boltzmann, lo cual es bastante difícil.

Si el problema aquí planteado fuera el de un fluido común (recordando que se quiere atacar el problema de un gas granular) se han encontrado dos posibilidades:

(A) El modelo de Euler o del fluido perfecto

$$p_{ij} = p\delta_{ij}q_i = 0 \quad (2.68)$$

(B) El fluido viscoso de Navier-Stokes

$$\begin{aligned} p_{ij} &= p\delta_{ij} - \mu\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i}\right) - \lambda\frac{\partial V_k}{\partial x_k}\delta_{ij} \\ q_i &= -k\frac{\partial T}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (2.69)$$

donde μ y λ son los coeficientes de viscosidad y k es el coeficiente de conducción de calor.

Ahora bien, el propósito del siguiente capítulo es encontrar expresiones análogas a las presentadas en (A) y (B) para un medio granular, es decir, mostrar que las ecuaciones de conservación se cumplen en el medio y hallar las relaciones constitutivas del medio.

Capítulo 3

Segregación en una mezcla binaria

En este capítulo se obtendrán las leyes de balance y las relaciones constitutivas para una mezcla granular. Se iniciará demostrando la naturaleza disipativa de los choques en el interior de una mezcla granular ([18]), luego se obtendrán las ecuaciones de balance y relaciones constitutivas para una mezcla granular binaria ([17]), primero para discos (caso bidimensional) y luego para una mezcla de esferas (caso tridimensional), como una generalización del caso bidimensional.

Para derivar las leyes de balance y relaciones constitutivas para flujos planos de una mezcla binaria densa de discos planos lisos y aproximadamente elásticos, se utilizarán métodos de la teoría cinética ([2]) y ([21]). Supondremos que los discos tienen diferentes masas y radios y coeficientes de restitución que caracterizan los choques en el interior del medio granular.

Después se conjuntarán las ecuaciones de balance y las relaciones constitutivas a las ecuaciones hidrodinámicas, de lo que finalmente se obtendrá un conjunto de ecuaciones diferenciales. Se verán algunos casos particulares como el presentado en ([37]).

3.1. Naturaleza disipativa de las colisiones binarias en un medio granular

Se trabajará con partículas de dos especies diferentes, A y B , con forma de discos circulares lisos y homogéneos. Las partículas de la especie A tienen radio σ_A y masa m_A , y las de la variedad B tienen un radio σ_B y masa m_B .

Considérese una colisión entre la partícula 1 de la especie i y la partícula 2 de la especie k , donde i y k pueden ser tanto A como B . Sean \mathbf{c}_1 y \mathbf{c}'_1 , la velocidad antes y después de la colisión de la partícula 1 respectivamente, y definamos \mathbf{c}_2 y \mathbf{c}'_2 de la misma forma para la partícula 2, entonces las velocidades relativas,

\mathbf{c}_{21} y \mathbf{c}'_{21} , antes y después de la colisión son

$$\begin{aligned}\mathbf{c}_{21} &= \mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}'_{21} &= \mathbf{c}'_2 - \mathbf{c}'_1.\end{aligned}\quad (3.1)$$

Sea \mathbf{k} el vector unitario dirigido del centro de la partícula 2 al centro de la partícula 1. Se tiene que las velocidades cumplen la ecuación

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}'_{21} = e_{ik}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21}) \quad (3.2)$$

donde e_{ik} es el coeficiente de restitución para la colisión entre una partícula de la especie i y una de la especie k ($0 \leq e_{ik} \leq 1$).

Sea $m_{ik} = m_i + m_k$ y $M_i = \frac{m_i}{m_{ik}}$, note que para las colisiones entre partículas de la misma especie:

$$M_i = \frac{m_i}{m_{ii}} = \frac{m_i}{m_i + m_i} = \frac{1}{2} = M_k. \quad (3.3)$$

Sea G_{ik} la velocidad del centro de masa, recuerde que si se tienen dos partículas con velocidades \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_2 la velocidad del centro de masa se define como:

$$\mathbf{v}_{\text{cm}} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} \quad (3.4)$$

Entonces, se tiene que

$$\mathbf{G}_{ik} = M_k\mathbf{c}_2 + M_i\mathbf{c}_1 = M_k\mathbf{c}'_2 + M_i\mathbf{c}'_1, \quad (3.5)$$

es decir,

$$\mathbf{G}_{ik} = \frac{m_k\mathbf{c}_2 + m_i\mathbf{c}_1}{m_{ik}} = \frac{m_k\mathbf{c}'_2 + m_i\mathbf{c}'_1}{m_{ik}}, \quad (3.6)$$

la cual se puede escribir como:

$$\mathbf{G}_{ik}m_{ik} = m_k\mathbf{c}_2 + m_i\mathbf{c}_1. \quad (3.7)$$

Restando $M_k\mathbf{c}_{21}$ de ambos miembros en la ec. (3.6) y desarrollando se obtiene:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{ik} - M_k\mathbf{c}_{21} &= \mathbf{G}_{ik} - \frac{m_k}{m_i + m_k}(\mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1) \\ &= \mathbf{G}_{ik} - \frac{m_k}{m_i + m_k}\mathbf{c}_2 + \frac{m_k}{m_i + m_k}\mathbf{c}_1 \\ &= \mathbf{c}_1,\end{aligned}\quad (3.8)$$

entonces se tiene

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{ik} - \frac{m_k}{m_i + m_k}\mathbf{c}_2 &= \mathbf{c}_1\left(1 - \frac{m_k}{m_i + m_k}\right) \\ &= \frac{m_k - m_k + m_i}{m_i + m_k}\mathbf{c}_1 \\ &= \frac{m_i}{m_i + m_k}\mathbf{c}_1\end{aligned}\quad (3.9)$$

entonces, al despejar \mathbf{c}_1 de la ec. (3.9) se tiene que

$$\mathbf{c}_1 = \frac{m_{ik}}{m_i} \mathbf{G}_{ik} - \frac{m_k}{m_i} \mathbf{c}_{21}. \quad (3.10)$$

Análogamente para \mathbf{c}'_1 se encuentra

$$\mathbf{c}'_1 = \frac{m_{ik}}{m_i} \mathbf{G}_{ik} - \frac{m_k}{m_i} \mathbf{c}'_{21} \quad (3.11)$$

así, restando (3.10) de (3.11) se tiene que:

$$\mathbf{c}'_1 - \mathbf{c}_1 = M_k(\mathbf{c}_{21} - \mathbf{c}'_{21}) \quad (3.12)$$

y como se esta suponiendo que las partículas son suaves

$$\mathbf{c}'_1 - \mathbf{c}_1 = M_k(1 + e_{ik})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21})\mathbf{k}. \quad (3.13)$$

Análogamente para la segunda especie de partículas

$$\mathbf{c}'_2 - \mathbf{c}_2 = -M_i(1 + e_{ik})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21})\mathbf{k}. \quad (3.14)$$

Igualando las ecs. (3.13) y (3.14) se tiene que

$$\mathbf{c}'_2 - \mathbf{c}_2 = -\mathbf{c}'_1 - \mathbf{c}_1. \quad (3.15)$$

Sea $\psi = \psi(\mathbf{c})$ una propiedad de la especie i de las partículas, $\psi' - \psi$ puede ser calculada durante una colisión. Por ejemplo, sea dicha propiedad la energía

$$\psi = \frac{m_i c_i^2}{2} = \frac{m_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i}{2} \quad (3.16)$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{m_i c_i^2}{2} - \frac{m_i c_i'^2}{2} &= \frac{1}{2} m_i [2M_k(1 + e_{ik})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{21})] \\ &- M_k^2(1 - e_{ik}^2)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21})^2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

lo cual lleva a que la energía no se conserva

$$\frac{1}{2} m_k ((c_2')^2 - c_2^2) \neq \frac{1}{2} m_i ((c_1')^2 - c_1^2) \quad (3.18)$$

Esta condición será importante cuando se desee atacar la solución de las ecuaciones hidrodinámicas para el medio granular, ya que permite despreciar la ecuación de balance de energía, ya que tal balance no existe en el medio granular.

3.2. Leyes de balance

Considérese la propiedad $\psi = \psi(\mathbf{c})$ de la partícula. La razón de cambio en el tiempo de la cantidad total $\langle n_i \psi_i \rangle d\mathbf{r}$ en un elemento fijo de área $d\mathbf{r}$ es la suma

de los promedios de los flujos netos en los elementos de partículas relacionando ψ_i . Sea C_{ik} la razón de producción de ψ_i por unidad de área en las colisiones con partículas de la especie k y \mathbf{F}_i la fuerza externa experimentada por una partícula de la especie i , entonces la ley de balance para la propiedad ψ_i de la partícula de la especie i tiene la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n_i \psi_i \rangle + \nabla \cdot \langle n_i \mathbf{c}_i \psi_i \rangle - \langle n_i \frac{d\mathbf{c}_i}{dt} \cdot \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{c}_i} \rangle = \sum_{k=A,B} C_{ik}(\psi_i) \quad (3.19)$$

donde la aceleración de la i -ésima partícula de acuerdo con la segunda ley de Newton es

$$\mathbf{a}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}. \quad (3.20)$$

Para un par de partículas, sin importar la especie, la función de distribución está dada como

$$f_{ik}^{(2)} = f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{r}_2, t) \quad (3.21)$$

y C_{ik} está dada en términos de dicha función de distribución. Al tiempo t

$$f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{r}_2, t) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (3.22)$$

es el número de partículas tal que la partícula i está en el elemento diferencial $d\mathbf{r}_1$ cuyo centro es \mathbf{r}_1 y con velocidad \mathbf{c}_1 , mientras que la partícula k está en el elemento diferencial $d\mathbf{r}_2$ cuyo centro es \mathbf{r}_2 y velocidad \mathbf{c}_2 .

Supongáse que al tiempo t la partícula i está localizada entre \mathbf{r} y $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ con centro en \mathbf{r} con su velocidad en el elemento diferencial $d\mathbf{c}_1$ y centro \mathbf{c}_1 ; entonces en un incremento de tiempo dt , el número de partículas con velocidades $d\mathbf{c}_2$ en \mathbf{c}_2 que colisionarán con esta sobre aquella parte de su frontera dentro del ángulo dk en \mathbf{k} es

$$f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k}, t) \sigma_{ik}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 d\mathbf{r} \quad (3.23)$$

donde $\sigma_{ik} = \sigma_i + \sigma_k$ y el factor $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik})$ son positivos. El factor $\sigma_{ik}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) dk dt$ es el área del paralelepípedo en el cual el centro de las partículas de la especie k debe estar para que ocurra la colisión. Entonces la razón de producción colisional $C_{ik}(\psi_i)$ por unidad de área en \mathbf{r} está dada por

$$C_{ik}(\psi_i) = \sigma_{ik} \iiint (\psi_i(\mathbf{c}'_1) - \psi_i(\mathbf{c}_1)) f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \quad (3.24)$$

donde las integraciones son llevadas sobre todos los valores de las variables para los cuales $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) > 0$.

Siguiendo la idea en ([4]), esta cantidad se puede descomponer en la siguiente forma

$$C_{ik}(\psi_i) = \eta_{ik}(\psi_i) + \Delta_{ik}(\psi_i) \quad (3.25)$$

con

$$\eta_{ik}(\psi_i) = \frac{1}{2} \iiint (\psi'_i - \psi_i)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) [f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k}) +$$

$$+ f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, r, c_2, r + \sigma_{ik}k) dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \quad (3.26)$$

y

$$\begin{aligned} \Delta_{ik}(\psi_i) = & \frac{1}{2} \iiint (\psi'_i - \psi_i)(\mathbf{k} \cdot c_{ik}) [f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k}) \\ & - f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} + \sigma_{ik}\mathbf{k})] dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \end{aligned} \quad (3.27)$$

para $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{ik}) > 0$, es decir, como la suma de una parte simétrica y una antisimétrica. Si se supone que la propiedad ψ se conserva en la colisión, esto es

$$\psi'_i + \psi'_k = \psi_i + \psi_k \quad (3.28)$$

entonces

$$\eta_{ik}(\psi_i) = -\eta_{ki}(\psi_i) \quad (3.29)$$

y

$$\Delta_{ik}(\psi_i) = \Delta_{ki}(\psi_i). \quad (3.30)$$

Aquí es necesario recordar la teoría acerca de la expansión en series de Taylor para funciones de varias variables. Se escribirá para dimensión dos y de ahí se deducirá la relación general. Sea $F(x, y)$ una función de dos variables x e y cuyas derivadas parciales de todos los órdenes existen en un punto (x_0, y_0) del dominio de la función, entonces dicha función se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned} F(x, y) = & F(x_0, y_0) + \left[\frac{\partial F}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial F}{\partial y}(y - y_0) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 F}{\partial y^2}(y - y_0)^2 \right] \\ & + \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^n F}{\partial x^n}(x - x_0)^n + \frac{\partial^n F}{\partial x^{n-1} \partial y}(x - x_0)^{n-1}(y - y_0) + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.31)$$

Empleando series de Taylor en (3.26) y (3.27) para $f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k})$ en $\mathbf{r} + \frac{1}{2}\sigma_{ik}$ y $f_{ki}^{(2)}(\mathbf{c}_2, \mathbf{r}, \mathbf{c}_1, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k})$ en $\mathbf{r} - \frac{1}{2}\sigma_{ik}$ y simplificando se obtiene

$$\begin{aligned} \eta_{ik}(\psi_i) = & \sigma_{ik} \iiint (\psi'_i - \psi_i)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21}) \\ & \times \left[1 + \frac{1}{2!2^2} \sigma_{ik}(\mathbf{k} \cdot \nabla)^2 + \dots \right] \\ & \times f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \sigma_{ik}\mathbf{k}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \sigma_{ik}\mathbf{k}) dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2, \end{aligned} \quad (3.32)$$

y

$$\Delta_{ik}(\psi_i) = -\nabla \cdot [\Theta_{ik}(\psi_i)], \quad (3.33)$$

cuando $\psi_i = \psi_i(\mathbf{c}_i)$, donde

$$\begin{aligned} \Theta_{ik}(\psi_i) = & \sigma_{ik}^2 \iiint \mathbf{k}(\psi'_i - \psi_i)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21}) \\ & \times \left[1 + \left(\frac{1}{3!2^2} \right) \sigma_{ik}^2 + \dots \right] \end{aligned}$$

$$\times f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \frac{1}{2}\sigma_{ik}\mathbf{k}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \frac{1}{2}\sigma_{ik}\mathbf{k}) dk d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2, \quad (3.34)$$

para $\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_{21} > 0$.

Sin embargo si, $\psi_i = \psi_i(C_i)$, entonces, como \mathbf{u} depende de \mathbf{r} , hay un término adicional en la expresión para $\Delta_{ik}(\psi_i)$,

$$\Delta_{ik}(\psi_i) = -\nabla \cdot [\Theta_{ik}(\psi_i)] - tr[\Theta_{ik}(\frac{\partial\psi_i}{\partial\mathbf{C}_i})\nabla\mathbf{u}]. \quad (3.35)$$

Aquí, tr denota la traza de la matriz.

La ley de balance (3.19) para la propiedad $\psi_i = \psi_i(\mathbf{c}_i)$ de la partícula i puede ser escrita ahora como

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_i\psi_i \rangle + \nabla \cdot [\langle n_i\mathbf{c}_i\psi_i \rangle + \sum_{k=A,B} \Theta_{ik}(\psi_i)] - n_i \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \cdot \langle \frac{\partial\psi_i}{\partial\mathbf{C}_i} \rangle = \sum_{k=A,B} \chi_{ik}(\psi_i) \quad (3.36)$$

donde i es A o B .

Por ejemplo cuando $\psi_i = m_i$, se obtiene la ecuación de balance para la masa de la especie i , es decir, se obtiene la ecuación de continuidad de (3.36),

$$\frac{\partial\rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i\mathbf{u}_i) = 0 \quad (3.37)$$

Si por otro lado, $\psi_i = m_i\mathbf{c}_i$, la ecuación que resulta de (3.36) es la ley de balance para el momento lineal,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i\mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\rho_i\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i + \pi_i) - n_i\mathbf{F}_i = \phi_i. \quad (3.38)$$

En este caso, el tensor de presiones, π_i para la especie i es la suma del transporte difusional y las contribuciones colisionales:

$$\pi_i = -\rho_i\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i + \langle \rho_i\mathbf{C}_i\mathbf{C}_i \rangle + \sum_{k=A,B} \mathbf{P}_{ik}, \quad (3.39)$$

donde

$$\mathbf{P}_{ik} = \Theta_{ik}(m_i\mathbf{c}_i); \quad (3.40)$$

y

$$\phi_i = \chi_{ik}(m_i\mathbf{c}_i), \quad \text{para } i \neq k. \quad (3.41)$$

Como una consecuencia de la ecuación (3.13), el tensor de presión colisional \mathbf{P}_{ik} es simétrico y por lo tanto el momento lineal se conserva, la fuente de momento ϕ_i resulta sólo de colisiones entre partículas diferentes.

Sumando los balances individuales de los momentos individuales, recordando las definiciones y propiedades de las diferentes velocidades y empleando la ecuación de balance de masa (3.37), se puede escribir el balance de momento lineal para la mezcla como:

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{P} + n\mathbf{F}, \quad (3.42)$$

donde el tensor de presión total \mathbf{P} es la suma del tensor de presión conductiva \mathbf{P}_i de cada especie.

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_i &= \pi_i + \rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i = \langle \rho \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i \rangle + \sum_{k=A,B} \mathbf{P}_{ik}, \\ n_{\mathbf{F}} &= n_A \mathbf{F}_A + n_B \mathbf{F}_B,\end{aligned}\quad (3.43)$$

y se ha usado

$$\phi_A = \chi_{AB} m_A \mathbf{c}_A = -\chi_{BA} (m_B \mathbf{c}_B) = -\phi_B. \quad (3.44)$$

Cuando la propiedad ψ_i de la partícula es una función de \mathbf{C}_i en lugar de \mathbf{c}_i , las leyes de balance son más complicadas, ya que en este caso, el cambio intrínseco en ψ_i es debido tanto al cambio en \mathbf{c}_i como a la variación de \mathbf{u} , y un término adicional en la descomposición de la producción colisional debe ser empleado

$$\begin{aligned}& \frac{\partial}{\partial t} \langle n_i \psi_i \rangle + \nabla \cdot \left[\langle n_i \mathbf{c}_i \psi_i \rangle + \sum_{k=A,B} \Theta_{ik}(\psi_i) \right] \\ & + \sum_{k=A,B} \left[\Theta_{ik} \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{C}_i} \right) \nabla \mathbf{u} \right] - \langle n_i \frac{d\mathbf{C}_i}{dt} \cdot \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{C}_i} \rangle = \sum_{k=A,B} \chi_{ik}(\psi),\end{aligned}\quad (3.45)$$

donde

$$\frac{d\mathbf{C}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}, \quad (3.46)$$

o, con la ecuación (3.42),

$$\frac{d\mathbf{C}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - (\mathbf{C}_i \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \mathbf{P} - n\mathbf{F}). \quad (3.47)$$

Entonces, por ejemplo, si $\psi_i = \frac{m_i C_i^2}{2}$, el balance de las fluctuaciones de energía para la especie i resulta:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \langle n_i T_i \rangle &+ \nabla \cdot (n_i \mathbf{u}_i T_i + \mathbf{Q}_i) \\ &+ tr(\mathbf{P}_i \nabla \mathbf{u}) - n_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{v}_i - \frac{\rho_i}{\rho} \mathbf{v}_i \cdot (\nabla \cdot \mathbf{P} - n\mathbf{F}) = \gamma_i\end{aligned}\quad (3.48)$$

Aquí \mathbf{Q}_i es el flujo de energía de las especies,

$$\mathbf{Q}_i = -n_i \mathbf{v}_i T_i + \frac{1}{2} \langle \rho_i \mathbf{C}_i C_i^2 \rangle + \sum_{k=A,B} \mathbf{q}_{ik}; \quad (3.49)$$

donde

$$\mathbf{q}_{ik} = \Theta_{ik} \left(\frac{m_i C_i^2}{2} \right), \quad (3.50)$$

y γ_i es la fuente de energía colisional,

$$\gamma_i = \sum_{k=A,B} \chi_i \left(\frac{m_i C_i^2}{2} \right). \quad (3.51)$$

Si sumamos los balances de energía, se obtiene la ecuación de balance de fluctuación de energía para la mezcla

$$n \frac{dT}{dt} - T \nabla \cdot \mathbf{j} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \text{tr}(\mathbf{P} \nabla \mathbf{u}) + \sum_{i=A,B} \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{j} - \gamma. \quad (3.52)$$

Aquí, \mathbf{j} es el flujo de partículas,

$$\mathbf{j} = n_A \mathbf{v}_A + n_B \mathbf{v}_B, \quad (3.53)$$

el flujo de energía de la mezcla \mathbf{q} es la suma de los flujos conductivos de energía \mathbf{q}_i

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{Q}_i + n_i \mathbf{v}_i T_i = \frac{1}{2} \langle \rho_i \mathbf{C}_i C_i^2 \rangle + \sum_{k=A,B} \mathbf{q}_{ik} \quad (3.54)$$

y la razón de disipación γ es el negativo de la suma de las fuentes de energía colisional γ_i .

Finalmente, si se toma $\psi_i = m_i \mathbf{C}_i$ en la ecuación (3.38), se obtiene la ley de balance para la velocidad de difusión \mathbf{v}_i la cual después de ciertas manipulaciones algebraicas, puede escribirse en la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{v}_i &= -(\mathbf{v}_i \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \mathbf{P} - n \mathbf{F}) \\ &- \frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \pi_i + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i + \frac{1}{\rho_i} \phi_i. \end{aligned} \quad (3.55)$$

3.3. Relaciones constitutivas

En esta sección el propósito es encontrar expresiones para los flujos colisionales \mathbf{P}_{ik} y \mathbf{q}_{ik} y las fuentes colisionales ϕ_i y γ_i . Para lograr este objetivo, es necesario definir la forma completa para las funciones de distribución para el par de partículas $f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k})$ durante el contacto.

Suponiendo que no existe correlación alguna en las velocidades de un par de discos justo antes de que choquen, y empleando el método de Enskog de tomar en cuenta las correlaciones en las posiciones del par, entonces la función de distribución completa del par en la colisión puede ser escrita como el producto de la distribución de velocidades de una sola partícula de cada disco y un factor que toma en cuenta el hecho de que el área de los discos es una fracción significativa del área ocupada por el material granular

$$\begin{aligned} &f_{ik}^{(2)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k}, \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k}) \\ &= g_{ik}(\mathbf{r}) f_i^{(1)}(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k}) f_k^{(1)}(\mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.56)$$

donde el factor g_{ik} incorpora los efectos del área excluida y las partículas que son excluidas durante los choques y corresponde al valor de equilibrio local de la función de distribución radial. Se supone aquí que está evaluada en el punto medio de las líneas de los centros de un par en colisión. Dicha cantidad es función del radio y las densidades de número y está dada como ([18]):

$$g_{ik} = \frac{1}{1 - \nu} + \frac{9}{8} \frac{\sigma_i \sigma_k}{\sigma_i + \sigma_k} \frac{\zeta}{(1 - \nu)^2} \quad (3.57)$$

donde ν es la fracción de área total, dada como la suma de las fracciones de área de las especies

$$\nu_i = n_i \pi \sigma_i^2 \quad (3.58)$$

y

$$\zeta = \pi(n_A \sigma_A + n_B \sigma_B) \quad (3.59)$$

Ahora se especificará la forma de la función de distribución de una sola partícula $f_i^{(1)}(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$. Aquí en lugar de intentar obtenerla directamente como solución de la ecuación de Boltzmann, simplemente se supondrá que dicha función tiene la forma de una Maxwelliana

$$f_i^{(1)}(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) = \frac{n_i m_i}{2\pi T_i} e^{-\frac{m_i(\mathbf{c} - \mathbf{u}_i)^2}{2T_i}} \quad (3.60)$$

donde $(\mathbf{c} - \mathbf{u}_i)^2 = (\mathbf{c} - \mathbf{u}_i) \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u}_i)$, los campos medios n_i , T_i y \mathbf{u}_i son evaluados en la posición \mathbf{r} del centro del disco de la especie i en el tiempo t . Distinguiendo entre las posiciones de los centros de un par de discos colisionando en la ecuación (3.56), se conserva la posibilidad de calcular flujos de las propiedades de la partícula para la función de distribución Maxwelliana. Esto puede ser probado al determinar las perturbaciones a la Maxwelliana usando la expansión de Chapman y Enskog ([21]).

La distribución de velocidades es aproximadamente Maxwelliana si los gradientes espaciales de los campos medios son pequeños y los discos aproximadamente elásticos. Por lo tanto se restringirá la atención a tales situaciones. Además se supone que las velocidades de difusión \mathbf{v}_i son pequeñas y que la temperatura T_i de las especies difiere por cantidades pequeñas θ_i de la temperatura de la mezcla T :

$$T_i = T + \theta_i \quad (3.61)$$

con

$$n_A \theta_A + n_B \theta_B = 0. \quad (3.62)$$

En este caso la función de distribución (3.56) se puede expandir en serie de Taylor en el punto \mathbf{r} y se puede expresar en términos de \mathbf{v}_i y θ_i con un error que es cuadrático en pequeñas cantidades:

$$\begin{aligned} f_{ik}^{(2)} & \left(\mathbf{c}_1, \mathbf{r} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{c}_2, \mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma_{ik} \mathbf{k} \right) \\ & = g_{ik} \frac{n_i n_k m_i m_k}{(2\pi T)^2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \sigma_{ik} (\mathbf{k} \cdot \nabla) \left(\ln \frac{n_i}{n_k} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2}\sigma_{ik} \left[\frac{m_i}{2T^2}(\mathbf{V}_{ik} + M_{ik}\mathbf{c}_{21})^2 - \frac{m_k}{2T^2}(\mathbf{V}_{ik} - M_i\mathbf{c}_{21})^2 \right] (\mathbf{k} \cdot \nabla)T \\
& + \frac{1}{2}\sigma_{ik} \left[\frac{m_i}{T}(\mathbf{V}_{ik} - M_k\mathbf{c}_{21}) - \frac{m_k}{T}(\mathbf{V}_{ik} - M_i\mathbf{c}_{21}) \right] \cdot [(\mathbf{k} \cdot \nabla)\mathbf{u}] \\
& + \frac{m_i}{T}(\mathbf{V}_{ik} + M_k\mathbf{c}_{21}) \cdot \mathbf{v}_i + \frac{m_k}{T}(\mathbf{V}_{ik} - M_i\mathbf{c}_{21}) \cdot \mathbf{v}_k \\
& + \frac{\bar{m}_i}{2T^2}(\mathbf{V}_{ik} + M_k\mathbf{c}_{21})^2\theta_i + \frac{\bar{m}_k}{2T^2}(\mathbf{V}_{ik} + M_i\mathbf{c}_{21})^2\theta_k \\
& - \frac{1}{T}(\theta_i + \theta_k) \left. \right\} e^{\left(-\frac{m_{ik}}{2T}V_{ik}^2 - \frac{m_i m_k}{2m_{ik}T}\mathbf{c}_{21} \right)}. \tag{3.63}
\end{aligned}$$

Aquí es necesario recordar que $M_i = \frac{m_i}{m_{ik}}$,

$$\mathbf{V}_{ik} = \mathbf{G}_{ik} - \mathbf{u} = M_i\mathbf{c}_i + M_k\mathbf{c}_k - \mathbf{u} \tag{3.64}$$

y los campos medios y sus derivadas espaciales son evaluadas en el punto medio \mathbf{r} de la línea de los centros.

En la expresión general para la fuente colisional (3.32) y el flujo colisional (3.34), reteniendo sólo los primeros términos en las expansiones en serie de Taylor. Entonces, empleando las definiciones (3.39), (3.40), (3.50) y (3.51) y usando la tabla de integrales que aparecen en el artículo de Jenkins y Richman ([19]) se pueden llevar a cabo las integraciones para \mathbf{P}_{ik} , ϕ_i , \mathbf{q}_{ik} y γ_i , obteniendo los siguientes resultados:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_{ik} & = \frac{\pi}{4}g_{ik}\sigma_{ik}^2 n_i n_k (1 + e_{ik}) \left\{ \left(T + \frac{m_i\theta_k + m_k\theta_i}{m_{ik}} \right) \mathbf{I} \right. \\
& \left. - \sigma_{ik} \left(\frac{2m_i m_k T}{\pi m_{ik}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\mathbf{D} + \frac{1}{2(tr\mathbf{D})} \mathbf{I} \right] \right\}, \tag{3.65}
\end{aligned}$$

donde \mathbf{I} es el tensor unitario y \mathbf{D} es la parte simétrica del gradiente de velocidades,

$$2\mathbf{D} = \nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T, \tag{3.66}$$

aquí el superíndice T indica la transpuesta;

$$\begin{aligned}
\phi_i & = \frac{\pi}{4}g_{ik}\sigma_{ik}^2 n_i n_k (1 + e_{ik}) T \left[\left(\frac{m_k - m_i}{m_{ik}} \right) \nabla \ln T + \nabla \ln \frac{n_i}{n_k} \right. \\
& \left. + \frac{4}{\sigma_{ik}} \left(\frac{2m_i m_k}{\pi m_{ik} T} \right)^{\frac{1}{2}} (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) \right], \tag{3.67}
\end{aligned}$$

para $i \neq k$;

$$\begin{aligned}
\mathbf{q}_{ik} & = g_{ik}\sigma_{ik}^2 \frac{n_i n_k}{m_{ik}} (1 + e_{ik}) T \left\{ \left[-\frac{1}{2}\sigma_{ik} \left(\frac{2\pi m_i m_k T}{m_{ik}} \right)^{\frac{1}{2}} \nabla \ln T + \left[\frac{\pi}{4} (m_i \mathbf{v}_i + m_k \mathbf{v}_k) \right] \right. \right. \\
& - \frac{m_k}{m_i} (1 - e_{ik}) \left[\frac{3}{16}\sigma_{ik} (m_k - m_i) \left(\frac{2\pi m_{ik} T}{m_i m_k} \right)^{\frac{1}{2}} \nabla \ln T \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{8}\sigma_{ik} \left(\frac{2\pi m_{ik}^3 T}{m_i m_k} \right)^{\frac{1}{2}} \nabla \ln \frac{n_i}{n_k} + \frac{3\pi}{8} m_{ik} (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) \right] \right\} \tag{3.68}
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 \gamma_i &= \sum_{k=A,B} 2g_{ik}\sigma_{ik}n_in_k(1+e_{ik})T \left\{ \frac{\pi}{8}\sigma_{ik} \left(\frac{m_i-m_k}{m_{ik}} \right) (\text{tr}\mathbf{D}) \right. \\
 &\quad - \left(\frac{2\pi m_i m_k T}{m_{ik}} \right)^{1/2} \left(\frac{\theta_i - \theta_k}{m_{ik} T} \right) \\
 &\quad - \frac{m_k}{m_{ik}}(1-e_{ik}) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi m_{ik} T}{m_i m_k} \right)^{1/2} - \frac{3\pi}{8}\sigma_{ik}(\text{tr}\mathbf{D}) \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{3}{4} \left(\frac{2\pi m_{ik} T}{m_i m_k} \right)^{1/2} \left(\frac{m_i \theta_i + m_k \theta_k}{m_{ik} T} \right) \right] \right\} \quad (3.69)
 \end{aligned}$$

Para discos casi elásticos las relaciones constitutivas pueden ser simplificadas un poco más. En este caso $(1 - e_{ik})$ es pequeña, así que, en el orden de aproximación, podemos reemplazar $(1 + e_{ik})$ por dos e ignorar los productos de $(1 - e_{ik})$ con los gradientes espaciales o las perturbaciones θ_i y \mathbf{v}_i .

3.4. Segregación en una mezcla binaria

Ahora ya se está en condiciones de ver algunos casos particulares. Se inicia suponiendo que el modelo hidrodinámico es válido, esto resulta de lo estudiado en la secciones 3.1, 3.2 y 3.3, en particular, se hará amplio uso de los resultados obtenidos en la sección anterior.

Considérese una mezcla binaria de partículas lisas y ligeramente inelásticas (pueden ser esferas o discos) con radio r_i ($i = l, s$), masa m_i y la densidad de número n_i . La densidad de masa de las especies es

$$\varrho_i(\mathbf{r}, t) = m_i n_i = \rho_i \psi_i \quad (3.70)$$

donde ϱ_i es la densidad material de la especie i y φ_i es su fracción de volumen. La densidad total de masa, $\rho(\mathbf{r}, t)$, y el número total de densidad, $n(\mathbf{r}, t)$, se define justamente como en ([17]).

La naturaleza disipativa de las colisiones entre las partículas es tomado en cuenta a través del coeficiente de restitución e_{ij} con $0 \leq e_{ij} \leq 1$.

Por simplicidad en una primera aproximación se supone que el flujo es unidireccional, es decir,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_i &= (0, v_i(y, t), 0) \\
 \frac{\partial}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial z} &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial y} &\neq 0 \quad (3.71)
 \end{aligned}$$

y despreciando los efectos viscosos, las ecuaciones del modelo hidrodinámico, las cuales corresponden a las ecuaciones de Navier-Stokes, se pueden escribir en la

forma:

$$\varrho_i \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{P}_i}{\partial y} - \varrho_i \mathbf{g} + \phi_i \quad (3.72)$$

Aquí, \mathbf{P}_i es la presión parcial de la especie i , \mathbf{g} es la aceleración gravitacional actuando en la dirección negativa del eje y , y ϕ_i corresponde al término de interacción entre diferentes partículas, el cual fue calculado en la sección anterior, y cumple con la condición:

$$\sum_{i=l,s} \phi_i = 0. \quad (3.73)$$

Recordando del capítulo dos que la ecuación de estado tiene la forma:

$$P_i = n_i Z_i T_i, \quad \text{con } Z_i = 1 + \sum_{j=l,s} K_{ij} \quad (3.74)$$

y

$$K_{ij} = \frac{\psi_i \chi_{ij} (1 + r_{ij})^d}{2} \quad (3.75)$$

donde Z_i es el factor de compresibilidad para la especie i , χ_{ij} es la función de distribución radial en el contacto y $R_{ij} = \frac{r_i}{r_j}$ la razón de tamaños.

Como se puede haber notado se tiene una ecuación de momento (3.72) para cada especie que forma la mezcla granular, una para la especie l

$$\varrho_l \frac{\partial \mathbf{v}_l}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{P}_l}{\partial y} - \varrho_l \mathbf{g} + \phi_l, \quad (3.76)$$

y otra para la especie s

$$\varrho_s \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{P}_s}{\partial y} - \varrho_s \mathbf{g} + \phi_s. \quad (3.77)$$

Sustrayendo la ecuación (3.77) de la ecuación (3.76) obtiene el siguiente resultado:

$$\varrho_l \frac{\partial \mathbf{v}_l}{\partial t} - \varrho_s \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{P}_l - \mathbf{P}_s) - (\varrho_l - \varrho_s) \mathbf{g} + (\phi_l - \phi_s). \quad (3.78)$$

Introduciendo la velocidad relativa entre las partículas, $\mathbf{v}_l^r = \mathbf{v}_l - \mathbf{v}_s$ y realizando algunas manipulaciones algebraicas la expresión (3.78) toma la forma :

$$\varrho_l \frac{\partial \mathbf{v}_l^r}{\partial t} = n_l \left[m_s \left(\frac{Z_l T_l}{Z_s T_s} \right) - m_l \right] g + \left[1 + \frac{p_l}{P_s} \right] \phi_l + P_l \frac{\partial}{\partial y} \left[\ln \left(\frac{P_s}{P_l} \right) \right] - \varrho_s \left(\frac{\varrho_l}{\varrho_s} - \frac{P_l}{P_s} \right) \frac{\partial v_s}{\partial t}. \quad (3.79)$$

De lo visto en la sección anterior, el término de fuente de momento se puede escribir en la forma:

$$\phi_l = n_l K_{ls} T \left[\left(\frac{m_s - m_l}{m_{ls}} \right) \frac{\partial}{\partial y} (\ln T) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\ln \left(\frac{n_l}{n_s} \right) \right] + \frac{4}{r_{ls}} \left(\frac{2m_l m_s}{\pi m_{ls} T} \right)^{1/2} (v_s - v_l) \right], \quad (3.80)$$

donde $T = n^{-1} \sum_{i=l,s} n_i T_i = \sum_{i=l,s} \xi_i T_i$ es la energía de la mezcla granular. Con suposiciones adicionales, como que los gradientes de los números de densidad y de la energía granular sean pequeños y conservando los términos del mismo orden en el límite de un solo intruso ($n_l \ll \ll n_s$), se obtiene la siguiente ecuación de evolución para el problema:

$$m_l \frac{dv_l^r}{dt} = \left[m_s \left(\frac{Z_l T_l}{Z_s T_s} \right) - m_l \right] g - \frac{4K_{ls} T}{r_{ls}} \left(\frac{2m_l m_s}{\pi m_{ls} T} \right)^{\frac{1}{2}} v_l^r + \left[m_s \left(\frac{Z_l T_l}{Z_s T_s} \right) - m_l \right] \frac{dv_s}{dt}. \quad (3.81)$$

Esta es la ecuación de evolución para la velocidad de un solo intruso: el primer término del lado derecho corresponde a la fuerza gravitacional actuando sobre el intruso, el segundo término representa la fuerza de arrastre y el tercer término representa un acoplamiento con la inercia de las partículas pequeñas.

Por el momento sólo se trabajará con la solución en el estado estacionario, es decir, no hay dependencia temporal de las velocidades, entonces se tiene que

$$v_l^r = \frac{r_{ls} g}{4K_{ls}} \left(\frac{\pi m_{ls}}{2m_l m_s T} \right)^{\frac{1}{2}} \left[m_s \left(\frac{Z_l T_l}{Z_s T_s} \right) - m_l \right]. \quad (3.82)$$

Cuando la velocidad relativa tiende a cero, se obtiene el criterio para la transición del efecto de la nuez de Brasil al efecto inverso:

$$m_s \left(\frac{Z_l T_l}{Z_s T_s} \right) - m_l = 0. \quad (3.83)$$

Como ya se habrá notado, resolver las ecuaciones (3.72) a las que se ha llegado después de bastante trabajo, es una tarea bastante difícil, así que no se intentará dar solución al problema de forma analítica, sino que se llevará a cabo un análisis cualitativo de la ecuación (3.81). En dicha ecuación, en la búsqueda de comprender el fenómeno de segregación, se descompone la fuerza neta gravitacional para un solo intruso de la siguiente forma:

$$F = g \left[(\rho_s - \rho_l) V_l + m_s \left(\frac{T_l}{T_s} - 1 \right) \frac{Z_l}{Z_s} + m_s \left(1 - \frac{V_l}{V_s} \right) + m_s \left(\frac{Z_l}{Z_s} - 1 \right) \right] \quad (3.84)$$

donde V_i es el volumen de la partícula de la especie i . El primer término

$$F_A^B = g(\rho_s - \rho_l) V_l, \quad (3.85)$$

es la fuerza de flotación Arquimideana efectiva, la cual aparece debido al peso del volumen desplazado por el intruso V_l . El segundo término,

$$F_B^T \propto (T_l - T_s), \quad (3.86)$$

representa la fuerza de flotación debida a la diferencia de energía entre las dos especies granulares, es decir, debido al rompimiento de la equipartición de la energía, recordando que la energía de un medio granular depende de la temperatura, este tipo de flotación puede ser denominada fuerza de flotación pseudo-térmica.

Como ya se habrá notado, hay dos términos en la ec. (3.84), los cuales al parecer no están relacionados con los efectos de flotación, el tercer término es negativo y se anula cuando el intruso es del mismo tamaño que las partículas que forman el medio. Hay que notar que $\epsilon_v^{st} = (\frac{V_i}{V_s} - 1)$ es el esfuerzo volumétrico. Así, ϵ_v^{st} es una fuerza estática compresiva, la cual depende de la diferencia en los tamaños entre el intruso y las partículas pequeñas.

El cuarto término $F_{dyn} \propto (\frac{Z_i}{Z_s} - 1)$ se anula cuando la fracción de volúmenes tiende a cero, es decir es un término que se debe también a la diferencia de volúmenes, como Z_i está relacionada con la presión parcial de la componente colisional del medio, entonces F_{dyn} es una propiedad dinámica del medio.

Así, los efectos geométricos debidos a la diferencia de tamaño contribuyen en dos nuevos tipos de fuerzas de segregación:

$$F_{ge} = F_{ge}^{st} + F_{ge}^{dyn} = -m_s(\epsilon_v^{st} - \epsilon_v^{dyn})g, \quad (3.87)$$

de donde se puede observar un término estático y uno dinámico. Dichos términos aparecen debido a la naturaleza inelástica de los choques en el medio durante la vibración. Como se puede ver también, las fuerzas de segregación tienen una dependencia del radio de las especies.

Capítulo 4

Simulaciones numéricas en mecánica del medio granular

Este capítulo final tiene como objetivo presentar un conjunto de simulaciones numéricas para el fenómeno de la nuez de Brasil. Las simulaciones se hacen con el método de elementos discretos, que se describe en la sección (4.3.1); sin embargo, para poner en contexto este método, en la sección (4.2) se describen brevemente algunos de los otros métodos que suelen usarse en el estudio de los medios granulares.

4.1. Introducción

Como se sabe, las ecuaciones de Navier-Stokes sólo tienen soluciones analíticas para algunos casos especiales. Cuando se trabaja el medio granular, bajo ciertas suposiciones a partir de la teoría cinética se llega a dichas ecuaciones, en un modelo que se denomina el modelo hidrodinámico, entonces es natural que dichas ecuaciones conserven las dificultades encontradas en la mecánica de fluidos. Es decir, la tarea de resolver las ecuaciones encontradas en el capítulo anterior es un trabajo realmente difícil, además que se habrá notado en el capítulo dos que la mecánica estadística sólo se utiliza para encontrar la ecuación de estado del medio granular, por todo lo anterior, es necesario acudir a las simulaciones numéricas.

De por sí, las simulaciones numéricas son importantes desde el punto de vista teórico, ya que ofrecen la posibilidad de explorar los efectos de una gran cantidad de parámetros importantes que no son accesibles en la experimentación o en la solución analítica del problema. En este sentido, las simulaciones numéricas han llegado a ser parte integral de la investigación en medios granulares([6]).

Además, las simulaciones numéricas junto con los experimentos constituyen

una prueba de validez de los modelos propuestos.

En particular, la simulación en medios granulares es ambiciosa, ya que partiendo de las propiedades elementales de los granos que forman el medio en el cual se está interesado, e incorporando algunas suposiciones teóricas se pretende predecir el comportamiento del medio.

4.1.1. Los retos de la simulación numérica

Realmente el medio granular no constituye un medio continuo. El medio es un sistema formado por muchos cuerpos sujetos a potenciales de interacción, lo cual significa que resolver el problema del comportamiento individual de las partículas que forman el medio granular es equivalente a resolver un problema de N cuerpos con pérdida de energía. Los modernos sistemas de computadoras pueden resolver el problema de N cuerpos, pero dichas simulaciones suelen no considerar el hecho de que debido a los choques en el interior del medio, hay disipación de energía.

El principal reto es entonces incorporar en la formulación de estos problemas las propiedades micromecánicas básicas que describen las interacciones importantes, de forma tan exacta como sea posible. Algunas otras decisiones importantes en la simulación de medios granulares son:

- 1.-¿Cuál es el intervalo de tiempo que debe considerarse como duración de las interacciones ?
- 2.-¿Cuál es la distancia de penetración ?
- 3.-¿Cómo se puede elegir el paso del tiempo propio en relación al intervalo de tiempo entre dos eventos sucesivos y la duración de la colisión ?
- 4.-¿Cuál es la mejor forma de modelar las leyes de fricción seca de Coulomb?

Todas estas cuestiones deben ser respondidas antes de intentar considerar una simulación realista.

4.2. Diferentes métodos de simulación

4.2.1. Dinámica molecular

Los materiales granulares consisten en un gran número de partículas que interactúan mediante fuerzas de corto alcance ([31]), es decir, sólo vía el contacto mecánico. La dinámica de medios granulares es gobernada por la ecuación de movimiento de Newton en el sistema de referencia del centro de masa de las partículas y los ángulos de Euler de sus partículas, i ($i = 1, 2, \dots, N$).

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\omega}_i), \\ \frac{\partial^2 \boldsymbol{\varphi}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{\hat{J}_i} \mathbf{M}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\omega}_i), \quad (j = 1, 2, \dots, N), \end{aligned} \quad (4.1)$$

la fuerza \mathbf{F}_i y la torca \mathbf{M}_i , los cuales actúan sobre el grano i de masa m_i y momento tensorial de inercia \hat{J}_i son en general funciones de las posiciones de las

partículas \mathbf{r}_j , su orientación angular φ_j y sus velocidades tanto angular como translacional ω_j y \mathbf{v}_j .

Si consideramos sistemas bidimensionales, la orientación angular de la partícula queda completamente descrita por la cantidad escalar φ_i y el momento de inercia se reduce a un escalar J_i . Entonces las ecuaciones de movimiento tienen la forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_i, \omega_i), \\ \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{J_i} \mathbf{M}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_i, \omega_i),\end{aligned}\quad (4.2)$$

La parte central de la dinámica molecular es calcular las fuerzas y los momentos que actúan sobre la partícula, y a partir de ello resolver numericamente las ecuaciones de movimiento simultáneas.

En general, el sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas (4.1) no puede ser resuelto analíticamente. La solución numérica aproximada de las ecuaciones, es decir, el cálculo de todas las trayectorias de las partículas del sistema, es llamada dinámica molecular.

Para partículas formando el medio granular en ausencia de campos de fuerza de largo alcance, la fuerza \mathbf{F}_i y el momento \mathbf{M}_i actuando sobre la partícula i está dada por la suma de los pares en interacción, es decir, de la partícula i con todas las demás partículas del sistema:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_i &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}, \\ \mathbf{M}_i &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{M}_{ij},\end{aligned}\quad (4.3)$$

La limitación a considerar la interacción entre pares es una abstracción justificada en el hecho de que las partículas sufren pequeñas deformaciones. Si la interacción produce deformaciones grandes es necesario tomar multi-interacciones ([31]).

Luego en la dinámica molecular se tiene que tratar con tres problemas en el cálculo de \mathbf{F}_{ij} y \mathbf{M}_{ij} :

- i) Suma de momentos y fuerzas de acuerdo con la ecuación (4.3),
- ii) Integración de las ecuaciones de movimiento (4.1),
- iii) extracción de los datos para las trayectorias de las partículas.

Condiciones de frontera

Las propiedades estáticas y dinámicas son afectadas por la interacción del medio granular con las fronteras del sistema, es decir, por las propiedades del contenedor o la superficie sobre la cual el medio está localizado.

En las simulaciones de dinámica molecular, las fronteras se incorporan construyendo paredes formadas por partículas que obedecen las mismas reglas de in-

teracción que el medio. Se eligen tamaños y posiciones adecuadas de las partículas que forman las paredes. En algunos casos el contenedor está en movimiento, como por ejemplo, cuando se pone a vibrar el contenedor de forma sinusoidal en la dirección vertical

$$y = A \cos(\omega t). \quad (4.4)$$

Otras condiciones de frontera importantes son las condiciones de frontera periódicas, es decir, la extensión periódica del área de la simulación en una o más dimensiones.

Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales definen los valores de las coordenadas $\mathbf{r}_i(t=0)$, las velocidades $\mathbf{v}_i(t=0)$, los ángulos de Euler $\varphi_i(t=0)$ y las velocidades angulares $\omega_i(\mathbf{t}=\mathbf{0})$ para $i = 1, \dots, N$. Para el caso de partículas esféricas, las fuerzas de interacción son independientes de la orientación de la partícula, por lo que las condiciones iniciales para ω_i no son necesarias.

Como las condiciones iniciales sólo se utilizan al principio de la simulación no es necesario desarrollar algoritmos sofisticados para su generación.

Para la integración numérica de las ecuaciones de Newton, se aplica un esquema predictor-corrector el cual requiere condiciones iniciales para derivadas temporales de orden más alto, $\mathbf{r}_i^{(n)}$ y φ_i^n , donde $n = 2, 3, \dots$. Para $n > 2$ estas cantidades no tienen significado físico directo.

Un ejemplo de la generación de condiciones iniciales puede ser la del perfil de velocidades de un flujo granular en una tubería; las condiciones iniciales pueden ser generadas colocando las partículas una por una aleatoriamente.

Modelos para partículas esféricas

El modelo más simple en tres dimensiones para un medio granular es una esfera; en dos dimensiones es un disco. Las simulaciones usando partículas esféricas son muy eficientes ya que las colisiones entre las partículas pueden ser identificadas en una forma muy simple: dos partículas están en contacto mecánico si

$$\xi_{ij} = R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > 0, \quad (4.5)$$

es decir, si la suma de sus radios excede la distancia entre sus centros. La cantidad ξ_{ij} es llamada la compresión mutua de las partículas i y j . Para cualquier otra forma de la partícula la detección de los contactos es más difícil que para las esferas. La fuerza entre las partículas en contacto está descrita por

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t & \text{si } \xi > 0; \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Para un sistema bidimensional, las componentes normal y tangencial de la fuerza pueden ser escritas en la forma:

$$\mathbf{F}_{ij}^n = F_{ij}^n \mathbf{e}_{ij}^n,$$

$$\mathbf{F}_{ij}^t = F_{ij}^t \mathbf{e}_{ij}^t, \quad (4.6)$$

donde

$$\mathbf{e}_{ij}^n = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}, \quad \mathbf{e}_{ij}^t = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{e}_{ij}^n, \quad (4.7)$$

La fuerza normal \mathbf{F}^n produce cambios en el movimiento translacional de las partículas; mientras que la fuerza tangencial \mathbf{F}^t produce cambios en el movimiento rotacional. Ambas fuerzas son funciones de la posición y velocidad relativa $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ y $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$.

Bosquejo del algoritmo para la dinámica molecular

La simulación de dinámica molecular se hace de acuerdo al siguiente algoritmo:

1. *Inicialización*: Las coordenadas y orientaciones angulares de las partículas (\mathbf{r}_i, φ) y sus derivadas con respecto al tiempo t son dadas.

2. *Predíctor*: Se calculan las coordenadas y sus derivadas con respecto al tiempo de las partículas en el tiempo $t + \Delta t$ como una expansión en serie de Taylor de los valores en el tiempo t utilizando un esquema de integración predictor-corrector.

3. *Fuerzas*: a) Selección de la interacción entre pares. b) Cálculo de la fuerza de interacción entre un par de partículas y entre las paredes y las partículas, basadas sobre las coordenadas y velocidades predichas. El cálculo de las fuerzas es único en el modelo utilizado.

4. *Corrector*: El segundo paso del esquema de integración es el corrector, en el cual se corrigen las coordenadas y sus derivadas temporales usando las fuerzas calculadas en el tercer paso de la simulación ([24]).

5. *Extracción de datos*: Los datos deseados se graban.

6. *Finalización del programa*: El programa termina después de un cierto tiempo predeterminado, o cuando un evento en el que se tiene especial interés ocurre, como por ejemplo, cuando el intruso alcanza la superficie del medio.

Para sistemas donde la duración típica de una colisión es mucho más corta que el tiempo medio entre dos colisiones sucesivas de una partícula, las partículas muy raramente están en contacto con más de una partícula. Así, la mayor parte del tiempo cada una de las partículas se mueve sobre una trayectoria balística, interrumpida por las colisiones con otras partículas por un tiempo breve. Lo que implica que las colisiones entre los pares de partículas puede ser consideradas como eventos instantáneos y cada uno de ellos puede ser tratado por separado.

En algunos casos los detalles de la fuerza de interacción entre las partículas granulares no se conoce como función de la posición relativa $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, la velocidad relativa $|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ y la orientación, ya que al derivar una función de este tipo se requiere una descripción microscópica de la partícula material, es decir, una descripción utilizando los conceptos de la mecánica del medio continuo, la cual podría ser muy complicada.

4.2.2. Dinámica molecular guiada por los eventos

Idea general

Al método de simulación de dinámica molecular discutido en la subsección anterior se le suele llamar dinámica molecular basada en fuerzas; este esquema se ha aplicado en la simulación de varias situaciones en medios granulares; Hay una variante conocida como método de simulación guiada por los eventos (Event-Driven Molecular Dynamics).

La principal suposición de este tipo de dinámica molecular es que en cualquier instante en el sistema entero, ocurre al menos una colisión de duración infinitesimal ([31]). Esta colisión altera las velocidades de las partículas involucradas en la colisión, la cual está caracterizada por los coeficientes de restitución. Con la hipótesis de una duración infinitesimal, dichos coeficientes describen la mecánica del par de partículas de forma completa, y por lo tanto es innecesario gastar tiempo en el cálculo de las trayectorias. Durante los intervalos de tiempo entre las colisiones, las partículas se mueven en trayectorias balísticas, por lo que las posiciones de las partículas en el tiempo posterior a la colisión pueden ser calculadas en un paso. Este algoritmo es más eficiente que el basado en fuerzas, ya que evita la integración numérica de las ecuaciones de movimiento.

Colisión de partículas.

La velocidad relativa de las partículas en colisión i y j en el punto de contacto, \mathbf{g}_{ij} , está determinada por las velocidades rotacional y translacional de las partículas:

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_{ij} &= (\mathbf{v}_i - \omega_i \times R\mathbf{e}_{ij}^n) - (\mathbf{v}_j + \omega_j \times R\mathbf{e}_{ij}^n) \\ &= \mathbf{v}_{ij} - R(\omega_i + \omega_j) \times \mathbf{e}_{ij}^n,\end{aligned}\quad (4.8)$$

con $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, R el radio de la partícula, y \mathbf{e}_{ij}^n el vector unitario de la partícula i a la partícula j . Las velocidades normales y tangenciales en la colisión están dadas por las proyecciones:

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_{ij}^n &= (\mathbf{g}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}^n)\mathbf{e}_{ij}^n, \\ \mathbf{g}_{ij}^t &= -\mathbf{e}_{ij}^n \times (\mathbf{e}_{ij}^n \times \mathbf{g}_{ij}).\end{aligned}\quad (4.9)$$

Los coeficientes de restitución en la dirección normal y tangencial, ε^n y ε^t , están definidos como:

$$\begin{aligned}(\mathbf{g}_{ij}^n)' &= -\varepsilon^n \mathbf{g}_{ij}^n, \text{ con } 0 \leq \varepsilon^n \leq 1 \\ (\mathbf{g}_{ij}^t)' &= \varepsilon^t \mathbf{g}_{ij}^t, \text{ con } -1 \leq \varepsilon^t \leq 1\end{aligned}\quad (4.10)$$

donde los símbolos primados denotan los valores de las funciones después de las colisiones. Como recordamos del capítulo 1, las velocidades después de las colisiones se pueden escribir como funciones de las velocidades antes de la colisión y los coeficientes de restitución. A este conjunto de funciones se les conoce como

regla de la colisión y tienen la forma

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_i' &= \mathbf{v}_i - \frac{1 + \varepsilon^n}{2} \mathbf{g}_{ij}^n + \frac{\tilde{J}(\varepsilon^t - 1)}{2(\tilde{J} + 1)} \mathbf{g}_{ij}^t, \\
\mathbf{v}_j' &= \mathbf{v}_j + \frac{1 + \varepsilon^n}{2} \mathbf{g}_{ij}^n - \frac{\tilde{J}(\varepsilon^t - 1)}{2(\tilde{J} + 1)} \mathbf{g}_{ij}^t, \\
\omega_i' &= \omega_i - \frac{\varepsilon^t - 1}{2R(\tilde{J} + 1)} (\mathbf{e}_{ij}^n \times \mathbf{g}_{ij}^t), \\
\omega_j' &= \omega_j - \frac{\varepsilon^t - 1}{2R(\tilde{J} + 1)} (\mathbf{e}_{ij}^n \times \mathbf{g}_{ij}^t),
\end{aligned} \tag{4.11}$$

donde $\tilde{J} = J/mR^2$. Este conjunto de ecuaciones como se puede ver, es un sistema que contiene 12 variables desconocidas, 6 para las componentes de las velocidades y 6 para las componentes del momento angular.

Bosquejo del algoritmo

Usando la regla de colisión (4.11), el algoritmo para la simulación de un sistema de muchas partículas tiene la siguiente estructura:

1. Inicializar las posiciones \mathbf{r}_i , velocidades \mathbf{v}_i y velocidades angulares ω_i de las N partículas que forman el sistema en el instante $t = 0$.

2. Determinar el tiempo $t^* > 0$ cuando la siguiente colisión en el sistema ocurre, es decir, el tiempo:

$$t^* = \min(t_{ij} > 0 : |\mathbf{r}_i(t_{ij}) - \mathbf{r}_j(t_{ij})| = 2R, \quad i, j = 1, \dots, N). \tag{4.12}$$

3. Determinar las posiciones de todas las partículas en el instante t^* . En la ausencia de campos externos estas posiciones están dadas por

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i + (t^* - t)\mathbf{v}_i, \tag{4.13}$$

o para campo externo constante, por ejemplo, el campo gravitacional \mathbf{G} , por

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i + (t^* - t)\mathbf{v}_i + \frac{1}{2}\mathbf{G}(t^* - t)^2. \tag{4.14}$$

4. Calcular las nuevas velocidades trasaccionales y rotacionales de las partículas que chocan I y J por medio de la regla de la colisión (4.11):

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_I &: = \mathbf{v}_I(\mathbf{v}_I, \mathbf{v}_J, \omega_I, \omega_J) \\
\mathbf{v}_J &: = \mathbf{v}_J(\mathbf{v}_I, \mathbf{v}_J, \omega_I, \omega_J) \\
\omega_I &: = \omega_I(\mathbf{v}_I, \mathbf{v}_J, \omega_I, \omega_J) \\
\omega_J &: = \omega_J(\mathbf{v}_I, \mathbf{v}_J, \omega_I, \omega_J).
\end{aligned} \tag{4.15}$$

5. Adaptar el sistema al tiempo

$$t := t^*. \tag{4.16}$$

6. Proceder con el paso dos del algoritmo.

Ventajas y deventajas del método de simulación

Antes de mencionar las desventajas que presenta la dinámica molecular llevada por los eventos, es necesario hacer notar que este presenta, al menos, dos ventajas con respecto a la dinámica molecular basada en fuerza:

a) No es necesario conocer la fuerza de interacción como una función de las posiciones de las velocidades y las posiciones de las partículas. Los coeficientes de restitución ε^n y ε^t se pueden determinar de forma experimental como funciones de la velocidad relativa \mathbf{g}_{ij} y usar directamente.

b) El esfuerzo computacional es determinado por el número de colisiones. No es necesario gastar tiempo en la simulación en el cálculo de las trayectorias y velocidades de las partículas entre las colisiones.

La desventaja que aparece en la simulación usando dinámica molecular guiada por eventos es que para sistemas tridimensionales, el tiempo de simulación puede llegar a ser muy grande.

4.2.3. Simulación directa de Monte Carlo

Idea general

A diferencia de la dinámica molecular basada en fuerza o la dinámica molecular guiada por los eventos, los cuales se basan en el cálculo de las trayectorias que siguen las partículas, el método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) es un método no determinista. Aunque las trayectorias de las partículas no se calculan, el DSMC describe muchas observaciones experimentales para sistemas que están en estados de equilibrio, así como para sistemas que están fuera de equilibrio. Para establecer el algoritmo del DSMC será necesario recordar un poco de la terminología introducida en el capítulo 2, relativo a la teoría cinética.

El estado de un gas granular está descrito por una función de distribución de una partícula (que se considera puntual), $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, la cual cuantifica el número infinitesimal de partículas, $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{v}$, las cuales están localizadas en un volumen infinitesimal $d\mathbf{r}$ en la posición \mathbf{r} y cuyas velocidades están en el intervalo infinitesimal $d\mathbf{v}$ cercanas a \mathbf{v} , así, la integración sobre el espacio fase completa como resultado el número total de partículas:

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = N. \quad (4.17)$$

La función de distribución describe el sistema completamente al nivel de granos. Los campos hidrodinámicos del flujo de densidad del número de partículas, la velocidad de flujo $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, y la temperatura granular se escriben simplemente como los momentos de la función de distribución:

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &= \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \\ n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \int \mathbf{u}f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \\ \frac{3}{2}n(\mathbf{r}, t)k_B T(\mathbf{r}, t) &= \frac{m}{2} \int [\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)]^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Este conjunto de integrales es el punto de partida para el modelo hidrodinámico de la teoría de gases granulares. Toda la hidrodinámica basada sobre la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, depende de las propiedades de las partículas y de su interacción.

La idea de DSMC es determinar la función de distribución dependiente del tiempo $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ por medio de una simulación de cuasi-partícula. La dinámica de la función de distribución está gobernada por la ecuación de Boltzmann ([31]). Naturalmente, esta ecuación no describe el movimiento de las partículas, como lo hace la ecuación de Newton, sino un flujo de probabilidad que depende del tiempo. Así, las cuasi-partículas en DSMC son probabilidades en lugar de partículas reales.

Cada partícula de un sistema contribuye a la función de probabilidad $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, de acuerdo a sus coordenadas y sus velocidades. Así, la ecuación de Boltzmann puede, por un lado, ser derivada de la dinámica de las partículas ([21]). Por otro lado, la ecuación de Boltzmann puede ser transformada dentro de una dinámica de cuasi-partículas ([6]). Esta es la idea de la simulación directa de Monte Carlo.

Bosquejo del algoritmo

Para la simulación de un sistema dado, se deben definir dos constantes, el tamaño del paso de tiempo ΔT y el tamaño de la caja $L_{box} = L/N_{box}$, donde L es el tamaño del área del cubo de simulación y N_{box} es el número de cajas en cada dimensión espacial. Para un sistema en equilibrio, L_{box} y ΔT se pueden elegir como constantes de la simulación. En general ΔT y L_{box} pueden ser funciones del tiempo.

Para sistemas donde la velocidad térmica decae varios órdenes de magnitud, se llega rápidamente a un estado de equilibrio y esto lleva a la formación de estructuras.

Cada ciclo de iteración del algoritmo DSMC consiste de seis pasos:

1. El paso de tiempo Δt es elegido, de tal forma que $L_{box}/\Delta t$ es varias veces más grande que la velocidad promedio de la partícula. Este valor es estimado por medio de la temperatura actual del gas granular.

2. Las partículas son propagadas a la velocidad actual, despreciando las colisiones:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_i \Delta t, \quad i = 0, \dots, N - 1. \quad (4.19)$$

3. Las posiciones y velocidades de las partículas son modificadas de acuerdo a las condiciones de frontera, una vez más despreciando las colisiones entre partículas.

4. Las partículas son asignadas a sus cajas de acuerdo a sus posiciones \mathbf{r}_i .

5.- Las velocidades de las partículas son modificadas debido a las colisiones. Las colisiones son determinadas aleatoriamente, dependiendo de las características termodinámicas locales.

6. El tiempo del sistema es avanzado, $t = t + \Delta t$.

La iteración es repetida hasta que $t \geq t_{final}$

4.2.4. Dinámica de cuerpo rígido

Idea general

Mientras la dinámica molecular está siempre basada en la evaluación de las fuerzas de interacción, la dinámica de cuerpo rígido (algunas veces llamada dinámica de contacto) está basada en la idea opuesta. Las fuerzas de interacción son determinadas de los requerimientos de consistencia del comportamiento de las partículas. Este método supone partículas perfectamente rígidas. Como ejemplo, considérese una esfera rígida en reposo sobre una superficie rígida plana. Sobre ella actúan dos fuerzas, la gravitacional, $(-mg)$ y la fuerza de contacto vertical (F^n), para que se pueda hacer $F^n = 0$, la esfera se debería mover hacia abajo con una aceleración g , es decir, debería penetrar la superficie. Este es un comportamiento imposible desde el punto de vista físico por la propia elección de la fuerza F^n . El comportamiento correcto de la esfera es asegurado por un conjunto simple de condiciones:

Condición 1: Las fuerzas de contacto han de ser elegidas de tal forma que se eviten las deformaciones mutuas de las partículas en contacto.

Condición 2: Las fuerzas de contacto se anulan cuando el contacto se rompe.

Condición 3: No hay fuerzas normales atractivas.

Condición 4: Las fuerzas de fricción actúan de forma paralela al plano de contacto, es decir, perpendiculares a F^n . Sea F^* la fuerza tangencial que es necesaria para evitar que dos partículas se deslicen. Entonces la fuerza tangencial es $|F| = \min(|F^*|, |\mu F^n|)$. Si la partícula se desliza, la fuerza de fricción adopta su valor máximo $|F| = |\mu F^n|$, de acuerdo con las leyes de fricción seca de Coulomb. Su dirección es opuesta a la aceleración tangencial relativa.

Bosquejo del algoritmo

El estado de un sistema granular está descrito por las posiciones y orientaciones de sus partículas y por sus derivadas temporales correspondientes. Los contactos entre las partículas se pueden clasificar como de deslizamiento y adherencia. La red de contactos es modificada eventualmente por la creación y rompimiento de contactos, así como por la transformación de contactos de pegado en contactos de deslizamiento y viceversa. Cuando la red de contactos es modificada, el estado del sistema cambia cualitativamente. La simulación procede en pasos de tiempo discretos. Cada uno de ellos consiste en:

1. **Detección del contacto:** Todos los contactos existentes son registrados.

2. **Tratamiento de las colisiones:** Una colisión tiene lugar si dos partículas en contacto se mueven a velocidad relativa negativa. En este caso ninguna fuerza finita de contacto puede evitar la deformación de las partículas, ya que cualquier fuerza por muy grande que sea, necesita un tiempo corto pero finito. Así las deformaciones mutuas no deben ser omitidas. Por lo tanto, las colisiones deben ser tratadas separadamente.

3. **Pérdida de los contactos:** Después de la colisión, un número de partículas en contacto tienen una velocidad normal relativa positiva, es decir, estas

partículas pierden el contacto, y así, se quita de la lista de contactos.

4. **Formulación de ecuación de geometría:** Las componentes normales de las velocidades relativas en todos los contactos tenderá a cero. La ecuación de la geometría contiene toda la información acerca de las redes de contacto del sistema.

5. **Cálculo de las fuerzas:** Por medio de la ecuación de la geometría se calculan las fuerzas y aceleraciones relativas.

6. **Integración de las ecuaciones de movimiento:** Finalmente, la ecuación de movimiento es integrada para todas las partículas. Cuando se hace esta operación, puede ser necesario adaptar la ecuación de la geometría y recalculan las fuerzas.

4.2.5. Autómatas celulares

Este modelo fue propuesto por Bak, Tang y Wiesenfeld (BTW) ([6]) con el propósito de estudiar sistemas en estado de auto-organización crítica. Sin embargo el modelo de autómatas celulares está directamente relacionado con los procesos de avalancha, aunque se deben tener ciertas precauciones al hacerse esta generalización.

La idea general es la de apilar cuadrados para formar columnas contiguas de acuerdo al siguiente conjunto de reglas:

1) La diferencia de alturas entre dos columnas adyacentes no puede ser más grande que dos unidades. Esto simula efectivamente el ángulo de reposo, el cual no puede exceder un valor crítico sin que el sistema se colapse.

2) Cuando una columna se rearregla a sí misma como consecuencia de la excesiva altura relativa a sus vecinas se involucra el movimiento de un conjunto de dos celdas unitarias. Esto es parecido al efecto dominó en una avalancha.

Cualquier configuración inicial es permitida para alcanzar el estado de equilibrio de acuerdo con estas reglas. El resultado final es un sistema estable, el cual se toma como configuración inicial para los subsecuentes experimentos. Entonces se agregan cuadrados individuales de forma aleatoria al edificio en cada unidad de tiempo. Cada uno de estos eventos inicia un proceso de relajación del sistema, sujeto a las mismas reglas. Como se supone que la superficie del fondo es de tamaño finito, los cuadrados no se pueden acumular en esta región.

4.2.6. Reconstrucción del fondo a la superficie

Mientras que en las simulaciones de dinámica molecular el sistema acoplado de las ecuaciones de Newton es resuelto para todas las partículas, la idea fundamental de la reconstrucción del fondo a la superficie, es la de considerar el movimiento de las partículas secuencialmente. La deposición de las partículas de un empacamiento granular, por ejemplo, un montón sobre el plano $(x, y, 0)$, procede como sigue: La primera partícula es insertada en la posición $(x_1^{init}, y_1^{init}, z_1^{init})$. La coordenada z_1^{init} debe ser más grande que la altura final esperada del montón, las coordenadas x_1^{init} y y_1^{init} pueden ser elegidas de forma aleatoria o fija. La partícula entonces cae hasta el fondo en la posición $(x_1^{init}, y_1^{init}, R_1)$. En esta

posición la partícula permanecerá fija, entonces la segunda partícula es insertada en la posición $(x_2^{init}, y_2^{init}, z_2^{init})$, y cae a la posición $(x_2^{init}, y_2^{init}, R_2)$, y así sucesivamente.

En general el movimiento de cada partícula i es calculada con las paredes y las otras partículas ya depositadas $j = 0, 1, \dots, i-1$ consideradas como obstáculos fijos. Las posiciones de las partículas no son influenciadas por el movimiento de una nueva partícula. Así, la trayectoria de cada partícula es calculada mientras la fuerza de gravedad se toma en cuenta en la fuerza de arrastre. Las otras partículas y las paredes establecen las condiciones de frontera del movimiento. En esta forma, el sistema de ecuaciones de Newton para el problema de N cuerpos es desacoplado y se tienen ecuaciones de partícula independiente([31]).

A pesar de ello, el método no es aplicable para muchas situaciones. Como sólo una partícula se mueve en el tiempo, las trayectorias obtenidas son diferentes de aquellas obtenidas al resolver las ecuaciones de Newton.

4.2.7. Dinámica Browniana para la simulación de flujos granulares

La dinámica de Langevin se ha utilizado para modelar varios sistemas granulares, en particular, las propiedades del tamaño en los mecanismos de segregación. Los experimentos muestran que los flujos granulares no son homogéneos sino que tienden a formar cúmulos. Ciertamente la presencia de aire tiene mucho efecto en la formación de éstos.

Para derivar la ecuación de Langevin de partículas interactuantes en una tubería es necesario primero obtener la ecuación de Boltzmann. Considerése primero el movimiento de una sola partícula i moviéndose en una tubería vertical bajo la acción de la gravedad mg . La dirección positiva x apunta hacia abajo, es decir, en la dirección de la gravedad. La ecuación de Langevin se escribe

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= v_i \\ m\dot{v}_i &= -mg - \gamma v_i + \sqrt{2E\gamma}\xi_i(t). \end{aligned} \quad (4.20)$$

La fuerza friccional γv_i y la fuerza aleatoria de Langevin $\sqrt{2E\gamma}\xi_i(t)$ describen la interacción de la partícula con las paredes. Para la fuerza aleatoria, la interferencia blanca se supone de la forma

$$\begin{aligned} \langle \xi_i(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle &= \delta_{ij}\delta(t-t') \end{aligned} \quad (4.21)$$

La energía térmica $E = k_B T$ está determinada por la temperatura granular T la cual caracteriza el movimiento aleatorio de las partículas granulares. La expresión para la intensidad del ruido $\sqrt{2E\gamma}$ es exacta sólo en el equilibrio térmico. Es decir, no toma en consideración la interacción de partículas. En el estado estacionario se espera una distribución de Maxwell para la velocidad de la partícula de valor medio $v^0 = \frac{mg}{\gamma}$.

La distribución de la probabilidad $p(x, v, t)$ de encontrar partículas en el tiempo t , en la posición x , y con una velocidad v está gobernada por la ecuación de Fokker-Planck sin colisiones

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(g - \frac{\gamma v}{m} \right) p \right] - \frac{E\gamma}{m^2} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2} = 0 \quad (4.22)$$

Para incorporar el efecto de las colisiones en el modelo considérese primero el problema relacionado siguiente: En 1971 Prigogine y Herman estudiaron el tráfico vehicular sobre un camino e investigaron la formación espontánea de atascos de tráfico. Para la interacción de los automóviles supusieron que los más rápidos i en la parte trasera adoptan la velocidad de los más lentos j en frente cuando los alcanzan. Después de la interacción ambos carros se mueven a la misma velocidad v_j .

Aunque hay una estrecha relación entre el flujo de tráfico y el flujo de medios granulares, la aplicación directa de la ley de interacción entre vehículos a partículas granulares es problemática ya que éste viola la conservación de momento para las colisiones entre partículas. Esta restricción puede ser evitada si se supone que inmediatamente después del choque entre partículas sucede un choque entre las partículas y las paredes, por lo que el momento de la partícula está principalmente determinado por sus interacciones con las paredes y la violación del principio de conservación de momento para colisiones entre partículas es insignificante. El tubo en sí mismo no pertenece al sistema descrito por (4.20), es decir, no cambia su momento por medio de las colisiones con las partículas. Por lo tanto, para el flujo estacionario se puede suponer que el incremento de momento es debido a la gravedad y es absorbido por las paredes via choques inelásticos.

Para derivar la ecuación de Boltzmann se necesita la integral de colisión. La densidad de probabilidad $p(x, v, t)$ de partículas en la posición x moviéndose a velocidad v es incrementada por las colisiones con las partículas viajando más rápido a velocidad $v' > v$:

$$\left[\frac{\partial p}{\partial t}(x, v, t) \right]_{ganado} \propto \int_v^\infty p(x, v, t) p(x, v', t) (v' - v) dv' \quad (4.23)$$

ya que las partículas más rápidas adoptan la velocidad v de las más lentas. La razón del cambio de la densidad de probabilidad causada por una colisión con una partícula a velocidad v' es proporcional a las densidades de probabilidad en v y v' y además a la velocidad relativa de las partículas en colisión $v' - v$. La integración se hace sobre el intervalo $[v, \infty)$ ya que una colisión ocurre sólo si $v' > v$, en otro caso la distancia entre ambas partículas se incrementa y la colisión no puede ocurrir. Por otro lado, la probabilidad $p(x, v, t)$ decrece debido a las colisiones con las partículas más lentas, es decir, $v' < v$:

$$\left[\frac{\partial p}{\partial t}(x, v, t) \right]_{perdido} \propto - \int_v^\infty p(x, v, t) p(x, v', t) (v - v') dv' \quad (4.24)$$

Combinando las ecuaciones (4.23) y (4.24) la ecuación de Boltzmann para la densidad de probabilidad para una partícula $p(x, v, t)$ tiene la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(g - \frac{\gamma v}{m} \right) p \right] - \frac{E\gamma}{m^2} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2} = \\ C \int_{-\infty}^{\infty} p(x, v, t) p(x, v', t) (v - v') dv' = \\ C p(x, v, t) n(x, t) (u - v) \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde u es la velocidad material. La sección efectiva C es una constante complicada cuyo valor está determinado por la geometría de la tubería y las propiedades de las partículas granulares, las cuales deben ser determinadas experimentalmente. La ecuación de Boltzmann (4.25) describe la dinámica de la densidad de probabilidad de las partículas granulares en la tubería cuando las colisiones son consideradas. Ésta tiene una solución estacionaria

$$\begin{aligned} p^0(v) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T^0}} n^0 \exp \left[-\frac{m}{2k_B T^0} (v - u^0)^2 \right] \\ u^0 &= \frac{(mg - Ck_B T^0 n^0)}{\gamma} \\ T^0 &= \frac{E}{k_B} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Suponiendo el equilibrio termodinámico local, las ecs. (4.26) se pueden sustituir en (4.25), para obtener una vez más la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(\frac{F(n, T)}{m} - \frac{\gamma v}{m} \right) p \right] - \frac{E\gamma}{m^2} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2} = 0 \quad (4.27)$$

Esta ecuación tiene la misma forma que la ecuación (4.22) si la gravedad es reemplazada por una fuerza local autoconsistente $F(n, T)$

$$F(n, T) = mg - Ck_B T(x, t) n(x, T). \quad (4.28)$$

Al comparar con (4.20), se obtiene finalmente la ecuación de Langevin para una partícula granular fluyendo a través de una tubería bajo la acción de la gravedad y considerando las colisiones de las partículas:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= v_i \\ m\dot{v}_i &= F(n(x_i, t), T(x_i, t)) - \gamma v_i + \sqrt{2E\gamma} \xi_i(t). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Estas ecuaciones han sido derivadas para simular flujos granulares usando dinámica de Langevin. La discretización de las ecuaciones diferenciales estocásticas tales como (4.29) difiere de la discretización de las ecuaciones diferenciales ordinarias: la acción de la parte determinista es proporcional al paso del tiempo Δt , mientras que la acción de la parte estocástica es proporcional a $\sqrt{\Delta t}$,

reflejando el hecho de que la solución de una ecuación diferencial estocástica no tiene derivada en el tiempo. Así, al discretizar la ecuación de Langevin se tiene

$$\begin{aligned}x_i(t + \Delta t) &= x_i(t) + v_i(t)\Delta t \\v_i(t + \Delta t) &= v_i(t) + \frac{1}{m}[F(n(x_i, t), T(x_i, t)) - \gamma v_i]\Delta t + \frac{1}{m}\sqrt{2E\gamma\Delta t}z\end{aligned}\quad (4.30)$$

con z un número aleatorio. Este conjunto de ecuaciones se pueden usar directamente como una regla de iteración para la simulación numérica.

4.3. Resultados numéricos

En esta sección se explicará la elección del método numérico utilizado, se describirá el programa utilizado y se mostrarán los resultados obtenidos.

Como se habrá notado, al estudiar el fenómeno de segregación dentro del modelo hidrodinámico se llega a un conjunto de ecuaciones análogas a las de Navier Stokes en mecánica de fluidos; evidentemente intentar resolverlas numéricamente hubiera sido una tarea difícil.

En la sección anterior se han presentado todo un conjunto de métodos de simulación en medios granulares que se pueden agrupar en dos grandes clases, los métodos deterministas, que tienen por objetivo calcular las trayectorias de las partículas que forman el medio; a tal grupo pertenecen la dinámica molecular, la dinámica molecular guiada por los eventos, la dinámica de cuerpo rígido, la reconstrucción del fondo a la superficie y los autómatas celulares; por otro lado, están los métodos probabilísticos, los cuales sólo calculan los promedios de ciertas propiedades del medio tales como la velocidad; a este grupo pertenecen la simulación directa de Monte Carlo y la dinámica Browniana.

La reconstrucción del fondo a la superficie y los autómatas celulares son muy apropiados en el estudio de la formación de pilas y avalanchas, mientras que la dinámica Browniana y la simulación directa de Monte Carlo se utilizan en el estudio de los flujos granulares.

Para el estudio del efecto de la nuez de Brasil resultaba más adecuado usar un método de tipo dinámica molecular, la dinámica molecular guiada por los eventos, la dinámica de cuerpo rígido o el el elementos discretos que se esboza a continuación y es en el que está basado el programa usado en esta tesis.

El método de elementos discretos es una variación de la dinámica molecular, es decir, las ideas físicas tras la simulación son las mismas: resolver las ecuaciones de Newton para las partículas. La diferencia está en el método de integración de dichas ecuaciones, ya que mientras que la dinámica molecular usa predictor-corrector, el método de elementos discretos usa diferencias centrales, que son las adecuadas para el tipo de trayectorias que aparecen en nuestro problema.

4.3.1. Descripción del Programa Utilizado para las simulaciones

Para las simulaciones de este trabajo se utilizó un programa escrito por Carl Wassgren y que fue proporcionado por Roberto Zenit del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM. El programa utiliza elementos discretos. Es un modelo bidimensional. La condición inicial se crea en forma aleatoria. Se permite variar con facilidad los parámetros involucrados en la simulación, tales como la amplitud de la perturbación, la frecuencia de la oscilación, etc. También se permite generar medios granulares con cualquier número de partículas de diferentes propiedades.

El método de elementos discretos simula el comportamiento mecánico de un medio formado por un conjunto de partículas que interactúan entre sí a través de sus puntos de contacto. La disposición de las partículas dentro del conjunto global del sistema o medio es aleatoria, por lo que se puede formar medios con diferentes tamaños de partículas distribuidos a lo largo del conjunto, idealizando de este modo la naturaleza granular de los medios que usualmente se analizan y se simulan mediante esta técnica numérica. Principalmente se pueden distinguir las diferentes propiedades básicas que definen de forma global y a grandes rasgos este método de análisis numérico:

- a) las partículas como elementos discretos conforman el sistema complejo de partículas.
- b) Estos elementos distintos se desplazan independientemente unos de otros e interactúan entre sí en las zonas de contacto.
- c) En este método a nivel de cada partícula se hace uso de la mecánica del cuerpo rígido y los elementos discretos se consideran elementos rígidos.

El modelo constitutivo que define el comportamiento global del material es establecido en las zonas de contactos entre partículas. La caracterización de los contactos en el modelo se describe por los siguientes elementos mecánicos:

1. **Resortes:** Los elementos muelles describen la fase de comportamiento elástico del medio en la zona de contacto entre partículas. Este comportamiento elástico queda caracterizado por dos muelles, uno en la dirección de contacto normal y otro en la dirección tangencial, los cuales corresponden con la descomposición de fuerzas de contacto que se usan en la formulación del método.

2. **Pistones:** Por su parte los pistones son elementos que toman en cuenta la viscosidad del medio que se simula. En la formulación establecida indistintamente pueden emplearse varios modelos de contacto viscoso y no viscoso, lo que permite aplicar el modelo a un gran número de problemas mecánicos, tanto elásticos como viscoelásticos.

3. **Elementos de fricción :** Los elementos de fricción describen la pérdida de contactos y el fallo del material en la zona de contacto entre partículas. Cuando en el contacto se produce un rompimiento, esta partícula se desprende del medio.

Como el medio es descrito por un sistema de partículas es necesario emplear la ecuación de balance de la cantidad de movimiento. Supóngase para ello un sistema discreto formado por n elementos distintos tal que para cada partícula

i tiene una masa m_i , que se mueve con una aceleración a_i y está sometida a una fuerza f_i . En este caso la segunda ley de Newton establece que la fuerza que actúa sobre las partículas es igual a la masa de cada elemento discreto por su aceleración. Utilizando la definición de aceleración como la derivada de la velocidad y teniendo en cuenta el principio de conservación de la masa se tiene

$$f_i = m_i a_i = m_i \frac{dv_i}{dt} = \frac{d(m_i v_i)}{dt} \quad (4.31)$$

Definiendo la cantidad de movimiento de la partícula como el producto de su masa por su velocidad $m_i v_i$, la ecuación (4.31) expresa el hecho de que la fuerza que actúa sobre el elemento discreto es igual a la variación de la cantidad de movimiento de la misma. Aplicando este concepto y la segunda ley de Newton al sistema de n partículas discretas se tiene:

$$R(t) = \sum_i f_i = \sum_i m_i a_i = \sum_i m_i \frac{dv_i}{dt} = \frac{d(\sum_i m_i v_i)}{dt} \quad (4.32)$$

partiendo del hecho que se cumple el principio de conservación de la masa.

La ecuación anterior expresa el hecho de que la resultante de todas las fuerzas que actúan sobre el sistema discreto de partículas es igual a la variación por unidad de tiempo de la cantidad de movimiento del mismo.

La ley de Newton proporciona una relación fundamental entre el movimiento del sistema de partículas y las fuerzas que causan dicho movimiento. El sistema de fuerzas puede estar en equilibrio estático cuando las partículas no están en movimiento, es decir, no actúan fuerzas sobre los diferentes elementos o el medio en cuestión.

Las fuerzas, los desplazamientos, tensiones y deformaciones son determinados a nivel de cada contacto entre los diferentes elementos. En correspondencia con el modelo constitutivo empleado, estos elementos mecánicos son descompuestos en sus componentes normales y desviadoras.

La formulación establecida para el desarrollo del modelo mediante elementos discretos, adopta las siguientes hipótesis:

1. Las partículas o elementos son considerados como cuerpos rígidos.
2. El contacto ocurre en un punto o una área muy pequeña entre cada par de partículas.
3. En las uniones entre partículas se considera que existen contactos entre los elementos discretos.
4. Todas las partículas son circulares.
5. La generación del medio empleando elementos discretos es aleatoria.
6. Se trabaja en el campo de las pequeñas deformaciones.
7. El comportamiento constitutivo en la zona de contacto emplea una tolerancia (separación / penetración) donde las partículas se les permite cierta penetración (separación) en el punto de contacto, lo que implica desde el punto de vista numérico un contacto aproximado.
8. La distancia de penetración y la separación están relacionadas con la fuerza de contacto, la ley de fuerza-desplazamiento (modelo constitutivo de contacto);

y la magnitud de estos es pequeña con relación al tamaño de los elementos discretos o partículas.

En la formulación del modelo se pueden incluir elementos rígidos o paredes a los cuales se les pueden imponer condiciones de contorno como velocidades, desplazamientos, etc.

Bosquejo del algoritmo

La simulación del método de elementos discretos se hace de acuerdo al siguiente algoritmo:

1. Se Inicializa la simulación del medio ambiente y los estados de las partículas.
2. Se determinan las fuerzas actuando sobre cada partícula.

$$\mathbf{F}_i = \sum (b_i + c_{ij})$$

3. Se integran las ecuaciones de movimiento.
4. Se extraen los datos y se hacen mediciones.
5. El programa termina después de un cierto tiempo predeterminado, o cuando un evento en el que se tiene especial interés ocurre, como por ejemplo, cuando el intruso alcanza la superficie del medio.

4.3.2. Resultados numéricos

A continuación se presenta un conjunto de ilustraciones de las simulaciones numéricas más representativas. Se utiliza la siguiente notación: d_l para el diámetro de las partículas grandes, d_s para el de las pequeñas, ω para la frecuencia de oscilación, Γ para la aceleración adimensional, ρ_l para la densidad de los intrusos y ρ_s para la densidad de las partículas pequeñas.

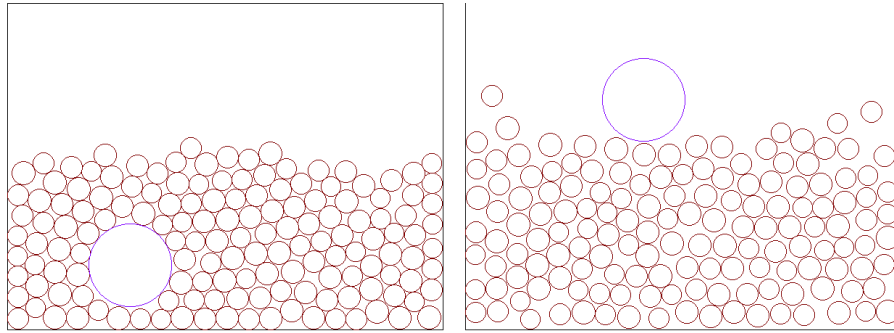


Figura 4.1: Simulación inicial y final con $d_l = 4 d_s$, $d_s = 1$, $\rho_s = 500$, $\rho_l = 100$, 150 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 12$, $\omega = 6$. (Véase el video C1.avi anexo)

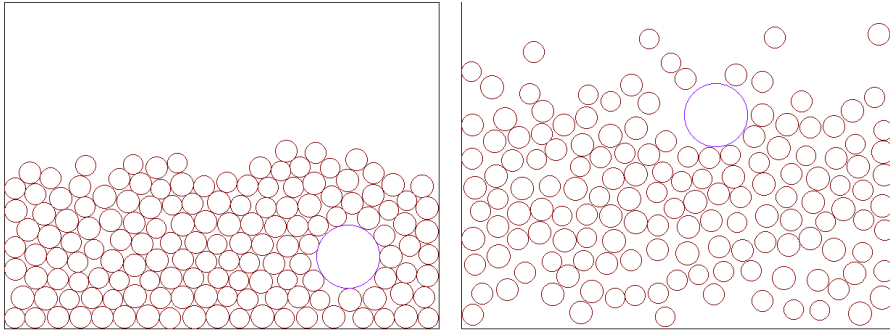


Figura 4.2: Simulación inicial y final con $d_l = 3 d_s$, $d_s = 1$, $\rho_S = 2500$, $\rho_l = 500$, 150 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 30$, $\omega = 10$

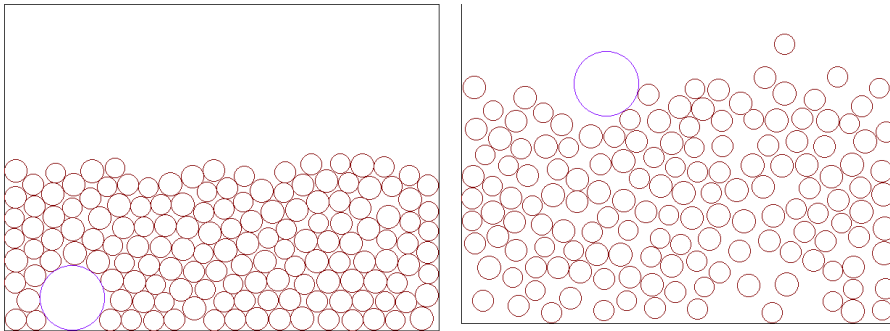


Figura 4.3: Simulación inicial y final con $d_l = 3 d_s$, $d_s = 1$, $\rho_S = 2500$, $\rho_l = 278$, 150 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 30$, $\omega = 10$. (Veáse el video C2.avi anexo.)

Las primeras cinco figuras muestran el fenómeno de la nuez de Brasil, en dichas simulaciones se consideraron variaciones de masa y se mantuvieron constantes la razón de los diámetros, al aceleración adimensional y la frecuencia de oscilación. Se pudo observar que entre mayor masa tenga el grano tarda más tiempo en elevarse. La figura (4.6) muestra el efecto inverso; en este caso la aceleración adimensional se tomó muy grande comparada con la frecuencia.

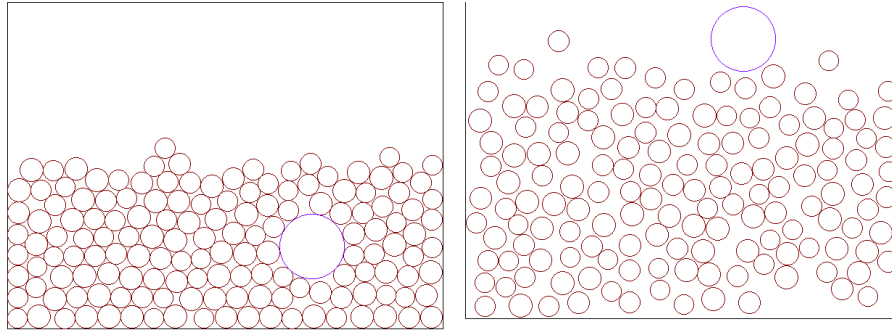


Figura 4.4: Simulación inicial y final con $d_l = 3 d_s$, $d_s = 1$, $\rho_S = 2500$, $\rho_l = 278$, 150 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 30$, $\omega = 10$. (Veáse el video C3.avi anexo)

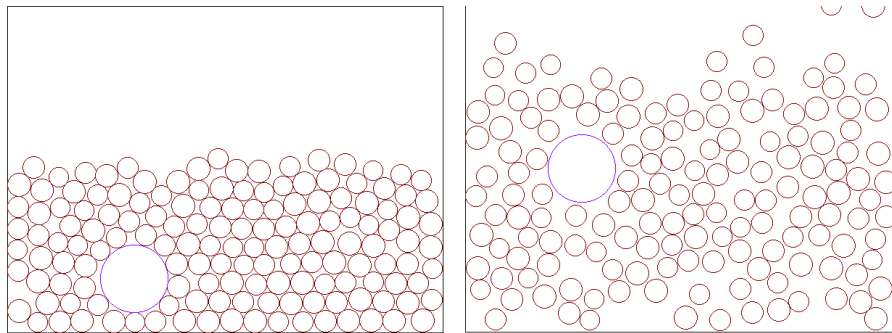


Figura 4.5: Simulación inicial y final con $d_l = 3 d_s$, $d_s = 1$, $\rho_S = 2500$, $\rho_l = 750$, 150 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 30$, $\omega = 10$. (Veáse el video C4.avi anexo)

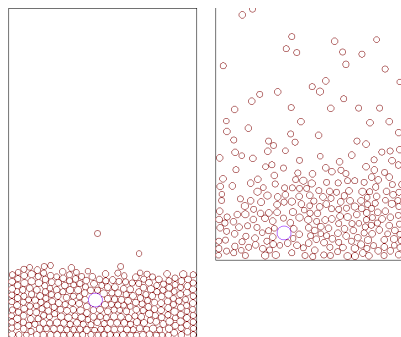


Figura 4.6: Simulación inicial y final con $d_l = 2 d_s$, $d_s = 7$, $\rho_S = 500$, $\rho_l = 500$, 300 partículas pequeñas y un solo intruso, $\Gamma = 6$, $\omega = 1$
(Véase la película C5.avi anexa)

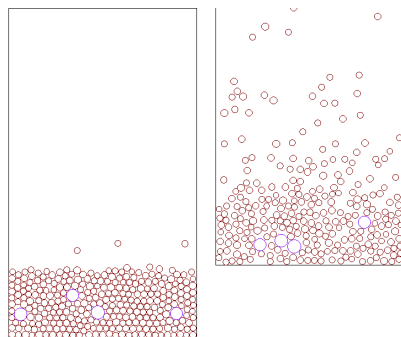


Figura 4.7: Simulación inicial y final con $d_l = 2 d_s$, $d_s = 7$, $\rho_S = 500$, $\rho_l = 500$, 300 partículas pequeñas y 4 intrusos, $\Gamma = 6$, $\omega = 1$
(Véase la película C6.avi anexa)

4.4. Conclusiones

En la tesis se estudiaron algunos aspectos sobre el fenómeno de la nuez de Brasil y su efecto inverso para un medio sujeto a vibraciones verticales sinusoidales, en particular las condiciones para que se puedan observar cada uno de los diferentes procesos.

Usando el modelo hidrodinámico basado en la aproximación de un intruso se llega a la condición de transición entre el efecto de la Nuez de Brasil y el efecto inverso, el cual muestra una dependencia en la temperatura granular, el factor de compresibilidad y la masa de las partículas. Algunos de estos factores no se consideran en los experimentos numéricos.

Utilizando simulaciones de elemento discreto, se llevaron acabo experimentos numéricos para el caso de un intruso inmerso en un medio formado por partículas más pequeñas, se encontró para varios de los experimentos el efecto de la nuez de Brasil, mientras que encontrar las condiciones del efecto inverso fue un poco más complicado.

Uno de los problemas que presentó la simulación, fue el hecho de que no se puede tener un control sobre las condiciones iniciales. Es decir, a pesar de que se pueden especificar el número de partículas y sus propiedades físicas, no se pueden especificar sus posiciones iniciales.

Los mecanismos que tienen mayor impacto en el efecto de la nuez de Brasil son: el de percolación y el de convección, como se puede ver de los resultados numéricos. Mientras que para que se de el efecto inverso es necesario que la probabilidad de que caigan las partículas grandes sea aproximadamente igual a la probabilidad de que caigan las partículas pequeñas, lo cual se logra al romper con el estado de condensación por parte de las partículas pequeñas y que las partículas grandes se condensen en el fondo del contenedor.

Las condiciones bajo las cuales se da el efecto inverso de la nuez de Brasil son mucho más especiales que las condiciones para que se de el efecto directo, ya que se necesitan amplitudes grandes de oscilación, y como la amplitud es directamente proporcional a la aceleración adimensional, e inversamente proporcional al cuadrado de la frecuencia de oscilación, se tienen que utilizar frecuencias suficientemente bajas.

Bibliografía

- [1] Meheboob Alam, Jeffrey T. Willits, Birgir Ö Arnarson and Stefan Luding, *Kinetic Theory of a binary mixture of nearly elastic disks with size and mass disparity*, Physics of fluids vol. 14, number 11, 2002.
- [2] Carlo Cercignani. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, Second edition, Plenum Press, 1990.
- [3] Steven C. Chapra y Raymond P. Canale. *Métodos Numéricos para Ingenieros*. Mc Graw Hill, 2001.
- [4] Dahler J. S. and Sather N. F. *Transport properties of polyatomic fluids, a Dilute Gas of Perfectly Rough Spheres*. Journal Chem. Physics, 30, pp. 2363-2382, 1963.
- [5] James W. Dufty, *Granular Fluids*, cond-mat. stat. mech, 0709.0479, 2007.
- [6] J. Duran, *Sands, Powders and Grains, An introduction to the Physics of Granular Materials*, Springer Verlag, 1999.
- [7] S. F. Edwards, *The full canonical ensemble of a granular system*, Physica A, 353, 2005, 114-118.
- [8] E. E. Ehrichs, H. M. Jaeger, Greg S. Karczmar, James B. Knight, Vadim Yu. Kuperman, Sydney R. Nagel, *Granular convection observed by magnetic resonance imaging*, Science, vol. 267, 1995.
- [9] A. Fierro, M. Nicodemi and A. Coniglio, *Equilibrium distribution of the inherent states and their dynamics in glassy systems and granular media*, Europhysics Letters, **59**(5), pp.642-647, 2002.
- [10] J. E. Galvin, S. R. Dahl and C. M. Hrenya, *On the role of non-equiparticion in the dynamics of rapidly flowing granular mixtures*, Journal of Fluid Mechanics, vol. 528, 2005.
- [11] Vicente Garzó. *Brazil-nut effect versus reverse Brazil-nut effect in a moderately dense granular fluid*, cond-mat.stat-mech, 2008.
- [12] Isaac Goldhirsch, *Rapid Granular Flows*, Annual Review of Fluid Mechanics, **35**, 2003

- [13] Daniel C. Hong and Paul B. Quinn, *Reverse Nut Brazil Problem: Competition between Percolation and Condensation*. Physical Review Letters, 2001
- [14] Hsiau and Hunt, Acta Mech. 114, 12, 1994.
- [15] D. A. Huerta and J. C. Ruiz-Montero, *Vibration-induced Granular Segregation. A Phenomenon Driven by three Mechanisms* Physical Review Letters, 2004.
- [16] Yimin Jiang and Mario Liu, *From elasticity to hypoplasticity*, Physical Review Letters, 99, 105501, (2007).
- [17] J.T. Jenkins and F. Mancini, *Balance Laws and Constitutive Relations for plane Flows of a Dense, Binary Mixture of Smooth, Nearly Elastic, Circular Disks*, Journal of Applied Mechanics, Vol 57, 1987.
- [18] J.T. Jenkins and F. Mancini, *Kinetic theory for binary mixtures of smooth, nearly elastic spheres*, Phys. Fluids A, **1** (12), 1989.
- [19] Jenkins, Richman, *Grad's 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres*, Archive for rational mechanics and Analysis, **87**, No.4, 1985.
- [20] Kudrolli, Arshad. *Size Separation in vibrated Granular Matter*, Reports on progress in Physics 67. 2004
- [21] Richard L. Liboff, *Kinetic theory: Classical, Quantum and Relativistic Descriptions*, Prentice Hall, 1990.
- [22] F. Mandl. *Física estadística*. Limusa, 1979.
- [23] Matthias E. Möbius, Benjamin E. Lauderdale, Sidney R. Nagel, Heinrich M. Jaeger. *Size separation of granular particles*. Nature, Vol. 414, 15 de noviembre del 2001.
- [24] Soichiro Nakamura. *Métodos Numéricos aplicados con Software*. Prentice Hall, 1994.
- [25] M. Oda and K. Iwashita. *Mechanics of Granular Materials: An Introduction*, A.A. Balkema, 1999.
- [26] J. M. Ottino and D. V. Khakhar, *Mixing and Segregation of Granulars Materials* , Annu. Rev. Fluid Mech. 2000.
- [27] M. Nicodemi, A. Coniglio, A. De Candia, A. Fierro, M. Pica Ciamarra, and M. Tarzia. *Statistical Mechanics of jamming and segregation in granular media*, cond-mat.stat-mech, 2004
- [28] T. Pöschel, N. Brilliantov, (Eds), *Granular Gas Dynamics* , Springer Verlag, 2003.

- [29] Massimo Pica Ciamarra, María Domenica De Vizia, Annalisa Fierro, Marco Tarzia, Antonio Coniglio, Mario Nicodemi. *Granular Species Segregation under Vertical Tapping: Effects of size, Density, Friction, and Shaking Amplitude*, Physical Review Letters PRL **96**, 058001 (2006).
- [30] O. Pouliquen, C. Cassar, P. Jop, Y. Forterre and M. Nicolas, *Flow of dense granular material: Towards simple constitutive laws*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and experiment, P07020, (2006).
- [31] Thorsten Pöschel and Thomas Schwager, *Computational Granular Dynamics, Models and Algorithms*, Springer Verlag, 2005.
- [32] Martin Rhodes, Shintaro Takeuchi, Kurt Liffman, Kannni Muniandy. *The role of interstitial gas in the Brazil Nut effect*. Granular Matter 5, 107-114, Springer-Verlag 2003.
- [33] Shinbrot, Troy and Fernando Muzzio. *Reverse Buoyancy in Shaken Granular Beds*, Physical Review Letters, vol. 81, number 20.
- [34] Shinbrot, Troy, *The Brazil nut effect in reverse* Nature, vol. 429.
- [35] M. Schroter, S Ulrich, J. Kreft, J. B. Swift and H. L. Swinney, *Mechanics in the Size Segregation of a Binary granular Mixture*, Physical review E74(2006), 011307.
- [36] L. Trujillo Meheboob Alam and H. J. Herrmann *Hydrodynamic Theory for reverse Brazil Nut Segregation and the Non-monotonic Ascension Dynamics*, Journal of statistical physics, vol. 124, 2006.
- [37] L. Trujillo, M. Alam and H. J. Hermann, *Segregation in a fluidized binary Granular Matter. Competition between Buoyancy and Geometric Force*, Europhysics Letters, 2003.
- [38] L. Trujillo and H. J. Hermann, *Hydrodynamic model for a particle size segregation in granular media*, Physica A: Statistical Mechanics and Applications, **330**, 2003.
- [39] L. Trujillo and H. J. Hermann, *A note on the upward and downward intruder segregation in granular media*, cond-mat.stat-mech. 2002.
- [40] J.T. Willits and B. Ö Arnarson, *Kinetic theory mixture of nearly elastic disks*, Physics of Fluids, vol. 11, number 10, 1999.