

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

Unidad Mérida

DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA

**“Estudio numérico de la distribución de esfuerzos de material
granular confinado y en descarga”**

TESIS

Que presenta

Rodolfo Guadalupe Blanco Rodríguez

Para obtener el grado de

Doctor en Ciencias

en la especialidad de

Física Aplicada

Director de Tesis:

Dr. Gabriel Guillermo Pérez Ángel

Estudio numérico de la distribución de esfuerzos de material granular confinado y en descarga

Rodolfo Guadalupe Blanco Rodríguez

Agradecimientos

Agradezco a mi asesor Dr. Gabriel Guillermo Pérez Ángel, por su tiempo, guía, apoyo, y por compartir sus conocimientos y experiencias durante mi formación. A mis sinodales, Dr. Ramón Castañeda Priego, Dr. Geonel Rodríguez Gattorno, Dr. Rodrigo Huerta Quintanilla y Dr. David Meneses, por sus comentarios y su valiosa ayuda en el trayecto final del trabajo.

Agradezco al CONACYT por el apoyo económico durante estos cuatro años de estudio. Parte de este trabajo fue realizado con recursos proporcionados por el CINVESTAV en sus clústeres de supercomputo ABACUS en Toluca y KUKULKAN en Mérida. Igualmente agradezco a la Universidad de Navarra por los recursos proporcionados durante mi corta estancia de investigación, y al Dr. Diego Maza y Dr. Raul Cruz Hidalgo por compartir sus conocimientos durante todo ese tiempo.

Agradezco a mi esposa Luz América por apoyarme, animarme y tolerarme en todo este trayecto de mi vida profesional. A mis padres, hermanas y amigos por hacer más amena esta importante etapa de mi vida.

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Resumen | IV |
| Abstract | VI |
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1. Materia granular | 1 |
| 1.1.1. Un gas extraño | 5 |
| 1.1.2. Un líquido extraño | 5 |
| 1.1.3. Un sólido extraño | 7 |
| 1.2. Problemática | 8 |
| 1.3. Objetivos | 10 |
| 2. Marco teórico | 13 |
| 2.1. Silos | 13 |
| 2.1.1. Modelo de Janssen | 17 |
| 2.2. Tolvas | 20 |
| 2.2.1. Flujo granular | 21 |
| 3. Metodología | 27 |
| 3.1. Método de elementos discretos | 27 |
| 3.1.1. Fuerzas de contacto | 29 |
| 3.1.2. Integración de las ecuaciones de movimiento | 33 |
| 3.2. Método de grano grueso | 34 |
| 3.2.1. Ecuación de continuidad | 35 |
| 3.2.2. Ecuación de conservación del momento | 36 |
| 4. Silo bidimensional | 41 |
| 4.1. Descripción de las simulaciones | 41 |
| 4.2. Variando el coeficiente de fricción | 46 |
| 4.3. Variando la dispersidad de radios | 46 |

| | |
|--|-----------|
| <i>ÍNDICE GENERAL</i> | III |
| 4.4. Variando el ancho del silo | 47 |
| 4.5. Variando el radio promedio | 52 |
| 5. Tolva cuasi-bidimensional | 61 |
| 5.1. Descripción de las simulaciones | 61 |
| 5.2. Validación de las simulaciones | 63 |
| 5.3. Variando el ángulo de la tolva | 72 |
| 6. Conclusiones y perspectivas | 83 |
| Bibliografía | 87 |

Resumen

Simulaciones de medios granulares fueron realizadas usando el método de elementos discretos para un silo bidimensional polidiserso y una tolva cuasibidimensional monodispersa. En el silo se verificó numéricamente el modelo derivado por Janssen y la suposición general de que las paredes cargan parte del peso de la columna granular debido a la fricción estática entre granos y ellos con las paredes. Variamos el coeficiente de fricción, la dispersión de radios, el ancho del silo, y el tamaño de granos. El modelo de Janssen llega a ser menos relevante cuando el ancho del silo incrementa y los esfuerzos tienden a un comportamiento más hidrostático. La distribución de esfuerzo normal y tangencial en las paredes evidenciaron puntos de máximos esfuerzo mientras que los esfuerzos internos mostraron zonas de concentración de carga, localizadas siempre alrededor de $2/3$ de la altura de la columna. Cambiar el tamaño de los granos afectó la distribución de esfuerzos, incrementando el peso en el fondo como el grano era más pequeño (manteniendo la misma masa total del granulado), dando otra vez un comportamiento más hidrostático y menos del tipo Janssen. Por otro lado, el modelo usado para nuestras simulaciones fue validado con datos experimentales de una tolva cuasibidimensional, implementando la fricción entre granos con los planos frontal y posterior, que generalmente no es considerada en este tipo de sistemas. Se varió el ángulo de la tolva y el tamaño del orificio de descarga. La velocidad y la fracción de sólido en el centro del orificio fueron ajustadas a modelos sugeridos en la literatura. Los esfuerzos internos mostraron una transición de zonas estáticas a zonas movilizadas conforme el ángulo aumenta. Observamos la existencia de puntos de máximo esfuerzo cinético donde sus posiciones forman arcos que se ajustan a parábolas o elipses para ángulos menores a 50° . El comportamiento del flujo observado sugiere que la variación del ángulo de la tolva tiene el mismo efecto en éste, independientemente del ancho del orificio cuando éste es más grande que doce veces el tamaño de un grano.

Abstract

Simulations of a polydispersed two-dimensional silo and monodispersed quasi-two-dimensional hopper were performed using the discrete element method. In the silo, we verified numerically the model derived by Janssen and the main assumption that the walls carry part of the weight due to the static friction between grains with themselves and those with the walls. We vary the friction coefficient, the radii dispersity, the silo width, and the size of grains. We find that Janssen's model becomes less relevant as the silo width increases since the behavior of the stresses become more hydrostatic. Likewise, the normal and tangential stress distribution on the walls evidencing the existence of points of maximum stress, and the internal stresses showed zones of concentration of load, located always at a height around $2/3$ of the granular columns. The size of the grains affected the distribution of stresses, increasing the weight on the bottom as the grains are made smaller (for the same total mass of the granulate), giving again a more hydrostatic and therefore less Janssen-type behavior for the weight of the column. On the other hand, the model used in our simulations was validated using experimental data of a quasi-two-dimensional hopper, implementing friction between grains with frontal and rear planes which is not considered in these kinds of systems. The angle of the hopper and the size of the discharge orifice were varied. The velocity and solid fraction in the middle of the orifice were fitted with models reported in the literature. The internal stresses showed a transition from static zones to mobilized zones while the hopper's angle increase. We observed points of maximum kinetic stress and their positions form arcs which fit to paraboles or ellipses for angles less than 50° . The behavior of the flow suggests that varying the angle of the hopper has the same effect on it, regardless of the size of the orifice when it's larger than twelve times the grain size.

Capítulo 1

Introducción

Arena, cereales, avalanchas de rocas e incluso cúmulos interplanetarios como los anillos de Saturno son ejemplos de la gran familia de medios granulares, compuesta por granos con diferentes formas y materiales, que aunque abarcan varios ordenes de magnitud en tamaño comparten características fundamentales. Son desordenados a nivel de granos pero se comportan como un sólido o un líquido a nivel macroscópico exhibiendo fenómenos tales como arqueo, avalanchas y segregación. Estamos rodeados diariamente de ellos y son fundamentalmente importantes en la industria, minería, agricultura y construcción. De igual manera están involucrados en procesos geológicos, determinando de una forma u otra la morfología del planeta tierra. Por consiguiente, esa es la principal motivación para el estudio de medios granulares. Se ha estimado que más del 50% de las ventas en el mundo involucran productos que han usado medios granulares en alguna etapa de su fabricación, convirtiéndolos en el segundo tipo de material más usado después del agua, en la escala de prioridades de la actividad humana. Cualquier avance en el entendimiento de la física de medios granulares tendrá un gran impacto económico [1].

1.1. Materia granular

A lo largo de la historia, el hombre ha estado en contacto con medios granulares ya sea para construcción, almacenamiento de cereales, etc. Uno de los usos más antiguos de materiales granulares en la construcción, utilizado por los Egipcios, fue el levantamiento de grandes y pesados obeliscos. Ellos llenaban cámaras de arena donde colocaban el obelisco horizontal, por vaciado de la arena, poco a poco el obelisco quedaba vertical. En la figura 1.1

se representa la técnica usada donde el medio granular (arena) es suficientemente fuerte para sostener el pesado obelisco, pero también fluye cuando la arena es removida en la base de la cámara. Cabe mencionar que en la base la presión satura debido a la fricción de la materia granular con las paredes, por lo que la base no soporta todo el peso del obelisco.

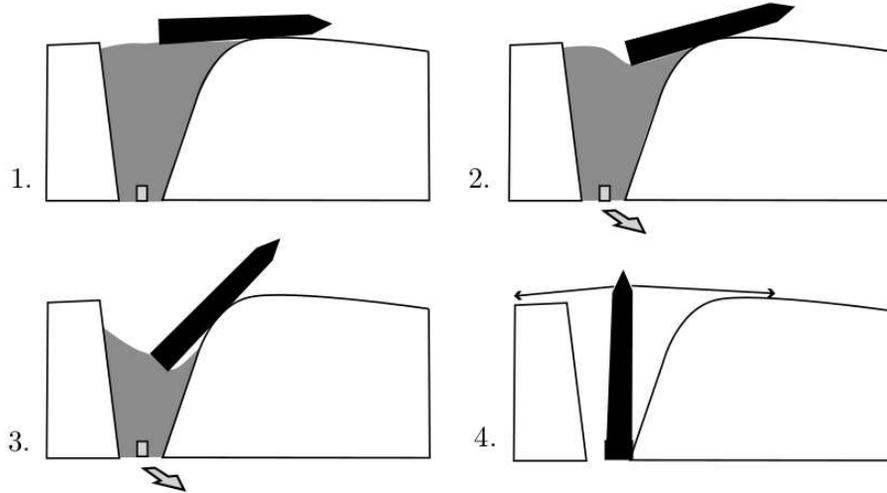


Figura 1.1: Técnica usada por los Egipcios para erigir un obelisco por drenado de una cámara llena de arena. Imágen tomada de [2].

Un medio granular es comúnmente definido como una colección macroscópica de partículas “rígidas”, las cuales tienen un tamaño típicamente más grande que $100 \mu\text{m}$. Esta limitación de tamaño corresponde a que se considera partículas no Brownianas y sin otras interacciones como de van der Waals. Si el tamaño de las partículas es menor a $100 \mu\text{m}$ se considera al medio como “polvo” donde se pueden presentar efectos electrostáticos o interacciones de van der Waals. A tamaños de partícula menor a $10 \mu\text{m}$ se considera el medio como “coloide”, donde la agitación térmica no es despreciable, pudiendo observarse el movimiento Browniano. Por lo tanto hay dos aspectos importantes que contribuyen con las propiedades de la materia granular: que la temperatura no juega un papel importante; y que las interacciones entre granos son disipativas debido a la fricción cinemática y colisiones inelásticas. Aún cuando la materia granular tiene similitudes con otros estados de la materia (gas, líquido y sólido), su comportamiento es muy diferente, por lo que podría considerarse un estado de la materia adicional *per se*. Podemos mencionar el comportamiento “extraño” de la materia granular clasificando

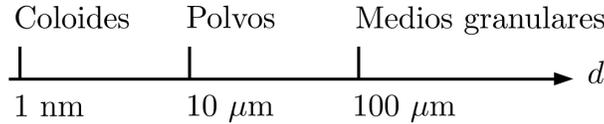


Figura 1.2: Clasificación de la materia particulada como función del tamaño d de sus partículas.

su similitud con los gases, líquidos y sólidos.

Sin embargo, los medios granulares no son sencillos de describir. Usualmente los medios granulares de interés son no cohesivos, por lo que la interacción entre partículas son fuerzas de contacto clásicas de repulsión, y la forma del sistema está determinada por fronteras externas y la gravedad ocupando gran variedad de estados metaestables. Debido al gran número de componentes en un sistema granulado, su estudio es muy complejo y por lo tanto difícil de predecir su comportamiento. Disipan energía cinética casi instantáneamente por colisiones y fricción entre granos, siendo una gran diferencia entre estos sistemas y sistemas clásicos estudiados con física estadística tales como moléculas e incluso coloides. De igual manera, los medios granulares son fuertemente dependientes de su historia, y el solo movimiento de un grano puede cambiar el estado en el cual se encuentre el medio. La interacción entre granos, aunque es solo de contacto, es muy compleja de describir, las leyes de sólidos en contacto involucran fenómenos no lineales y no triviales tales como la fricción e impactos inelásticos. Con la ayuda del computo actual apenas podemos simular un sistema con el número de granos contenidos en una cucharada de azúcar [2–4].

En una publicación de 1885, Reynolds observó que una masa compacta de granos encerrados en una envoltura flexible incrementa en volumen cuando la envoltura es deformada. Este es el *principio de dilatación* de Reynolds, siendo el primer principio de medios granulares. El segundo principio es llamado *principio de movilización de la fricción*. La fuerza de fricción entre dos granos toma un valor entre cero y un valor límite justo antes del movimiento relativo entre granos, este valor límite depende de la fuerza normal entre el granulado. Debido a esto la distribución de esfuerzos de un medio granular en reposo esta indeterminado. Sin embargo el flujo de un medio granular a través de una apertura es estable, por lo que parece que el estado de movimiento del medio puede ser determinado, la energía es minimizada de una manera bien definida. Este es el tercer *principio de mínima energía de flujos granulares*.

Por lo tanto la tasa de descarga de flujos granulares puede ser calculada desde la forma de la superficie de deslizamiento en la apertura [5].

La fricción es un concepto clave para este tipo de sistemas, y es debido a su naturaleza disipativa que los medios granulares presentan diversos fenómenos. Las leyes macroscópicas que gobiernan la fricción entre sólidos fueron estudiadas por Leonardo da Vinci realizando experimentos con bloques deslizantes, de éstos se pueden hacer tres observaciones: 1) la fuerza necesaria para que un bloque empiece a deslizarse es independiente del área de contacto, y por lo tanto la fuerza necesaria para mover varios bloques es también independiente de si estos están en línea o apilados; 2) esta fuerza es linealmente dependiente de la fuerza normal, que en este caso es el peso total de los bloques; 3) cuando el bloque esta deslizando, la fuerza de fricción es más pequeña que la fuerza necesaria para que se inicie el movimiento. Estas observaciones condujeron a formular las leyes clásicas de fricción escritas primero por Amontons en 1699 y desarrolladas por Coulomb en 1785. Si denotamos F_N y F_T como la magnitudes de las componentes normal y tangencial, respectivamente, de la fuerza aplicada sobre un bloque deslizante, las leyes Coulomb-Amontons son las siguiente: 1) existe una fuerza tangencial mínima para poner al bloque en movimiento, llamada fuerza de fricción estática, y es dada por $F_{T_s} = \mu_s F_N$, donde μ_s es un coeficiente de fricción estática de los sólidos en contacto, mientras no exista movimiento relativo entre los sólidos en contacto la fuerza tangencial es $F_T \leq \mu_s F_N$; 2) si el bloque se encuentra deslizando sobre la superficie, la magnitud de la fuerza de fricción (opuesta a la dirección de movimiento) es $F_{T_d} = \mu_d F_N$, donde μ_d es un coeficiente de fricción dinámica; 3) los coeficiente $\mu_{s,d}$ son constantes y dependen de los materiales en contacto y, típicamente, $1 > \mu_s > \mu_d > 0$.

Estas ideas de fricción han ayudado a entender el comportamiento de los medios granulares, y han sido numerosas investigaciones desde entonces hasta nuestros días las que han ayudado al entendimiento de diversos fenómenos granulares. Entre las investigaciones que se pueden mencionar están los descubrimientos de Faraday (1831) sobre la inestabilidad convectiva en un polvo vibrado, Reynolds (1885) quien introdujo la noción de dilatancia, el estudio de la saturación de la presión en el fondo de un silo realizado por Janssen (1895) entre otros. Incluso el conocimiento sobre pilas de arena ha sido usado para describir otros sistemas dinámicos disipativos, por ejemplo, De Gennes (1996) uso las avalanchas en pilas de arena como una imagen para el movimiento de líneas de flujo en superconductores tipo II [2].

1.1.1. Un gas extraño

La principal diferencia entre un gas o líquido con el medio granular es que la interacción entre sus granos es inherentemente inelástica tal que en cada colisión se pierde algo de energía, así que las aproximaciones basadas en interacciones puramente elásticas o la conservación de la energía (como la teoría de gases) no pueden ser consideradas. Tal inelasticidad en las colisiones granulares nos deja complicaciones al intentar aplicar las leyes de Newton a interacciones individuales grano-grano. Preguntas sobre la correcta dependencia de la velocidad en la fuerza de fricción, la importancia en la duración del impacto, o la inclusión de grados de libertad rotacionales han sido debatidas por años.

Debido a las colisiones inelásticas, la energía inyectada en la fronteras (como un baño de calor) puede no ser suficiente para termalizar el sistema, ya que suelen aparecer cúmulos de granos en el sistema que podrían no “fundirse”. Las condiciones para las cuales aparecen tales cúmulos han sido estimados: si se considera un sistema con extensión lineal L en un estado inicial uniforme de granos ocupando una fracción del volumen η , las soluciones provistas por la hidrodinámica Newtoniana serán inestables y formaran cúmulos si el producto ηL excede alguna constante que depende de los grados de inelasticidad, para L suficientemente grande el sistema siempre formará cúmulos sin importar la contribución inelástica de cada colisión.

Existe un tipo especial de aglomerado llamado “colapso inelástico” donde la inelasticidad puede en teoría permitir un número infinito de colisiones en un tiempo finito, dejando a las partículas en contacto sin movimiento relativo. La relación entre cúmulos y el colapso inelástico aún debe ser clarificada, puede considerarse un escenario donde, una vez formados los cúmulos, la pérdida de energía por colisión debe superar cierto valor crítico; también puede darse un escenario diferente donde todos los cúmulos son transitorios y eventualmente terminarán en colapso inelástico. De cualquier forma, estos fenómenos son suficientes para concluir que la hidrodinámica Newtoniana no es aplicable.

1.1.2. Un líquido extraño

La materia granular puede fluir como un líquido, y hay gran variedad de modelos teóricos que describen tales flujos. Podemos referirnos a esos modelos como *hidrodinámica granular*. El sistema granular está fuera del equilibrio debido a la disipación de energía en la materia granular, por lo tanto las ecuaciones de Navier-Stokes no son aplicables, sin embargo, se

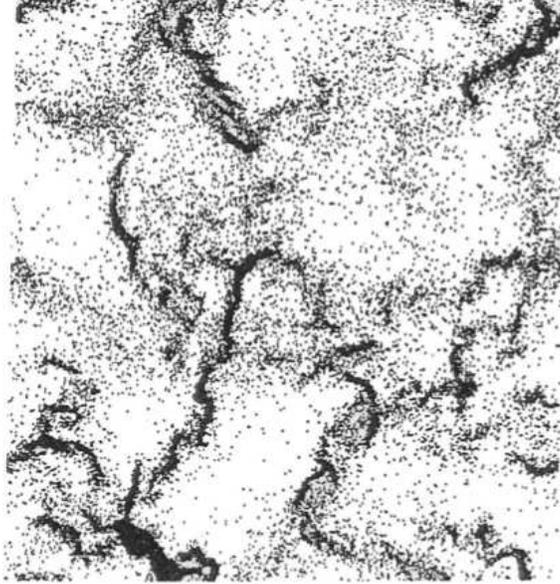


Figura 1.3: Una típica configuración de 40 000 partículas con coeficiente de restitución de 0.6 colisionando inelásticamente, exhibiendo cúmulos. Imagen tomada de [6].

han propuesto diversos modelos de flujos granulares pero aún están lejos de alcanzar lo que son las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos.

Los flujos lentos y densos, y los flujos rápidos y de baja densidad son idealizaciones para el desarrollo de modelos, pero los sistemas reales frecuentemente exhiben ambos flujos simultáneamente en diferentes dominios espaciales. Una pregunta abierta es ¿cómo modelar precisamente la transición entre los dos flujos?; existen modelos cinético-teóricos que son usados para describir materiales granulares cuando la densidad es baja, el otro extremo es tratado con modelos de deformación plástica cuasiestática basados en el principio de dilatación de Reynolds. Modelos específicos consisten en ecuaciones diferenciales parciales aumentadas con modelos constitutivos no locales. Éstos modelos son usados en mecánica de suelos y en el diseño de tolvas, sin embargo existen experimentos que no van de acuerdo con las predicciones teóricas e indican que la forma del grano tiene un rol importante que requiere mejor entendimiento.

Uno de los aspectos más fascinantes de los medios granulares, que se encuentra actualmente en debate, es el comportamiento que presentan cuando

el medio granular es vibrado. Cuando existe un flujo continuo de energía hacia el sistema se pueden observar diversos fenómenos como convección, formación de patrones, segregación por tamaño, y formación de pendientes. Estos fenómenos son observados cuando el sistema es vibrado en dirección vertical típicamente como $z = A \cos(\omega t)$ y cuando $\gamma \equiv A\omega^2/g$ es un poco más grande que la unidad; cuando γ es más grande se puede considerar un tipo de turbulencia granular.

En el proceso de vibración, el material granular se eleva sobre la base del contenedor, dilatando en el proceso, tal que un flujo macroscópico puede aparecer. Este flujo toma la forma de convección que continuamente transporta granos; con diferentes condiciones de frontera es posible invertir el sentido del flujo. Cuando el medio granular vibrado esta compuesto de partículas de diferente tamaño, las partículas más grandes se mueven a la parte superior independientemente de su densidad. Este fenómeno es conocido como “el efecto nuez de Brasil” debido a que las nueces más grandes alcanzan la superficie del contenedor después de agitarlo. Así que agitar materiales granulares no induce su mezclado, la dinámica dominante permite la separación por tamaños en contraste con los líquidos ordinarios a los cuales la entropía favorece un estado mixto homogéneo. Diversos experimentos muestran que otro parámetro relevante para estos fenómenos es la razón de energías cinética y potencial a una altura d , es decir, $mv^2/(mgd)$, donde d es el diámetro del grano.

1.1.3. Un sólido extraño

Debido a su naturaleza disipativa en ausencia de un flujo de energía externa, los materiales granulares aislados evolucionan a un estado estático independientemente de las condiciones iniciales, sin embargo, pequeñas variaciones en las condiciones iniciales pueden provocar diferencias notables en sus propiedades. Las fuerzas que aparecen en una pila de arena son muy heterogéneas formando cadenas donde el esfuerzo es particularmente intenso. La distribución de probabilidad de fuerzas en una pila de arena es considerada como $P(f) = c \exp(-f/f_0)$ donde c y f_0 son constantes.

Las cadenas de fuerza son importantes de igual manera para la transmisión de sonido en un medio granular. Una perturbación de una sola partícula fuera del amontonamiento, que es una parte en 10^5 , puede crear un cambio de 25 % en la transmisión del sonido. Así que el fenómeno macroscópico es muy sensible al movimiento y lugar de una sola partícula, debido a la heterogeneidad del sistema.

Dependiendo del procedimiento de llenado de un contenedor, se presenta

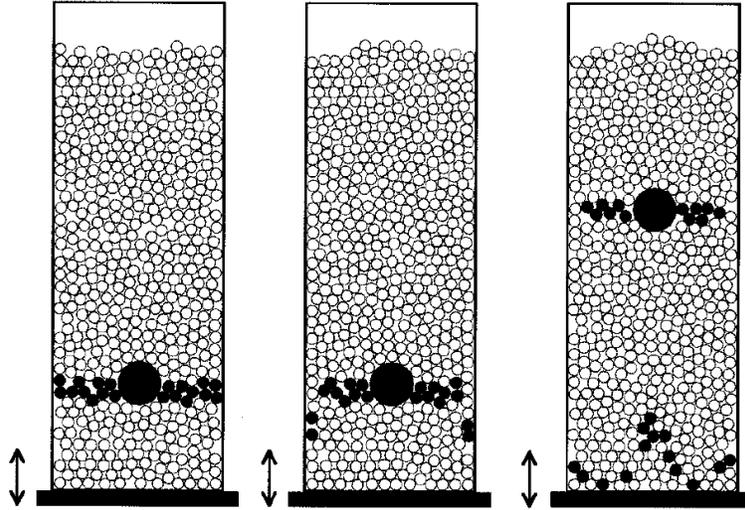


Figura 1.4: El efecto nuez de Brasil. La partícula más grande alcanza la superficie cuando el sistema es agitado. A la izquierda se observa la configuración inicial, a la derecha se observa la configuración final después de agitar el sistema. Imagen tomada de [7].

un empaquetamiento aleatorio de las partículas. Para partículas esféricas puede variar la fracción volumétrica η entre 0.55 y 0.64. A través de la fricción estática las cadenas de fuerza pueden mantener una configuración metaestable.

Ya que la energía $k_B T$ es despreciable, la densidad solo puede cambiar por perturbaciones externas. Mehta y Edwards (1989) han propuesto un nuevo formalismo que reemplaza la termodinámica convencional, intercambiando el Hamiltoniano por un volumen funcional siendo la entropía el logaritmo del número de estados de un volumen dado. Las otras cantidades termodinámicas son definidas en analogía con la termodinámica ordinaria, pero en vez de $k_B T$ usan una nueva temperatura efectiva que es dada por la compactividad del sistema [3].

1.2. Problemática

Existen diversos problemas alrededor del comportamiento de los medios granulares, la gran mayoría de las soluciones propuestas son empíricas, y muchas veces no tienen una clara conexión con las propiedades micromecá-

nicas del granulado. Algunas derivaciones de éstas soluciones se basan en suposiciones que, aunque dan buenos en muchos casos, fallan al cambiar las condiciones y propiedades del sistema, o cuando se escala a sistemas grandes a nivel industrial. El problema más importante en la industria se encuentra en el manejo del material granulado, esto es: el llenado, el almacenamiento y la descarga de este material; el desconocimiento de la física del medio granular utilizado provoca pérdidas económicas, materiales e incluso humanas.

En este trabajo se centra en dos etapas del procedimiento industrial mencionado arriba: el almacenamiento y la descarga del material granular. Para almacenar el material se utilizan estructuras llamadas “silos”. El material confinado forma esfuerzos asimétricos sobre las paredes, vacíos y un apantallamiento de la presión en la base. El modelo más utilizado para la predicción de la presión en el fondo es el propuesto por Janssen en 1895, sin embargo este modelo fue derivado a partir de experimentos con silos de maíz a nivel laboratorio [8], por lo que a nivel industrial no ha sido satisfactoriamente corroborado. Cabe aclarar que al ser un modelo empírico, se desconoce en general su dependencia con las propiedades del sistema. Por otro lado, se desconoce como las dimensiones del sistema afectan a la distribución de carga tanto en las paredes como en el interior del medio granular. No está demás comentar que no es fácil acceder a la información sobre la distribución de esfuerzos en el interior de forma experimental; y esa es una ventaja que ofrece el estudio numérico de estos sistemas.

El siguiente problema se encuentra en la descarga del granulado. Un mecanismo muy utilizado para este fin es la descarga por acción de la gravedad a través de orificios, ya sea en la base del silo o por tolvas. El control del flujo granular es primordial en estos procesos. Uno de las fórmulas más usadas para calcular el flujo a través de un orificio en la base de un silo es la llamada “Ley de Beverloo”, pero tiene la misma desventaja mencionada anteriormente, es una fórmula empírica y por consiguiente se desconoce de forma general su dependencia con las propiedades del sistema. Otra fórmula es la propuesta por Brown y Richards [9], la cual es derivada de argumentos micromecánicos y que considera tolvas con cierto ángulo de apertura. Ellos proponen que existe un arco a partir del cual los granos se encuentran en caída libre (free-fall arch), sin embargo la existencia de este arco es muy discutida además de que presupone una discontinuidad en la distribución de esfuerzo en el interior de la tolva.

Actualmente diversas investigaciones intentan resolver estas problemáticas, las cuales se expondrán en el siguiente capítulo. Sin embargo, no se encontró en la literatura trabajos que eluciden alguna respuesta a estas problemáticas considerando sistemas grandes, es decir, sistemas con un número

de partículas arriba de los 25000; o que tuviera una buena estadística. Otro detalle, es que los sistemas de descarga de granos se suelen estudiar con simulaciones numéricas bidimensionales, sin embargo, si queremos resultados comparables con los experimentos, entonces es necesaria la implementación tridimensional de esferas considerando fricción de éstas con los planos posterior e inferior de la celda cuasi-bidimensional (esto no se considera en la literatura). En este trabajo aprovechamos el computo acelerado por GPU para estudiar la distribución de esfuerzos en un medio granular estático y en flujo. La ventaja de utilizar cálculo por GPU y códigos implementados desde cero, es la posibilidad de manejar una gran cantidad de granos en simulaciones que toman menos tiempo comparadas con las que se realizan utilizando CPU; igualmente nos da la posibilidad de correr simulaciones equivalentes pero con condiciones iniciales distintas (copias) y de esa forma obtener promedios estadísticos fiables. Los resultados obtenidos de los silos se encuentra publicado en la revista científica *Physical Review E* 97, 012903 (2018) [10]. Los resultados de presentados en el estudio de tolvas se publicarán en dos artículos científicos: el primero se publicará en la revista científica *Granular Matter* y expondrá la validación del modelo y método de simulación utilizado por comparar con resultados experimentales de tolvas obtenidos por el Laboratorio de Medios Granulares de la Universidad de Navarra España (aún sin publicar); el segundo expondrá los resultados obtenidos en las tolvas de diferentes ángulos y aperturas de descarga el cuál se encuentra en la etapa de escritura del manuscrito y se espera publicar en unos meses.

1.3. Objetivos

El objetivo general de esta trabajo es verificar numéricamente los modelos (y sus suposiciones) utilizados para describir la presión en una columna granular y para el cálculo del flujo de descarga utilizando sistemas grandes a los comúnmente reportados en la literatura. Los objetivos específicos se dividen en dos, los del material contenido (silo) y los del material en descarga (tolvas).

Simulamos un silo bidimensional, obteniendo la distribución de esfuerzos internos, en las paredes y en la base. Uno de los objetivos como se mencionó es verificar el modelo de Janssen numéricamente. La parte novedosa de este trabajo es la implementación de la fricción estática para corroborar que las paredes cargan parte del peso, ya que sin esta no se puede llegar a la saturación de la presión en el fondo del silo (aún con la fricción dinámica implementada). Los otros objetivos son: explorar los límites de este modelo

de Janssen variando el coeficiente de fricción, la polidispersidad de radios, el ancho del silo, y el tamaño de las partículas; evidenciar zonas de máximo esfuerzo tanto en las paredes como en el interior de la columna granular; y observar la dependencia de la constante de proporcionalidad de Janssen con las variables anteriormente mencionadas.

Después simulamos una tolva cuasi-bidimensional donde uno de los objetivos principales es la validación de los resultados obtenidos con el modelo utilizado en las simulaciones comparándolos con los obtenidos por su análogo experimental. Una vez validado y calibrado los parámetros de simulación, se extrapolan los resultados experimentales simulando tolvas de diversos ángulos y tamaños de orificio de descarga para: observar la distribución de esfuerzos internos en ese estado de flujo, velocidades y densidades en la línea del orificio, la tasa de descarga, y la formación de los arcos de transición de esfuerzo cinético.

Capítulo 2

Marco teórico

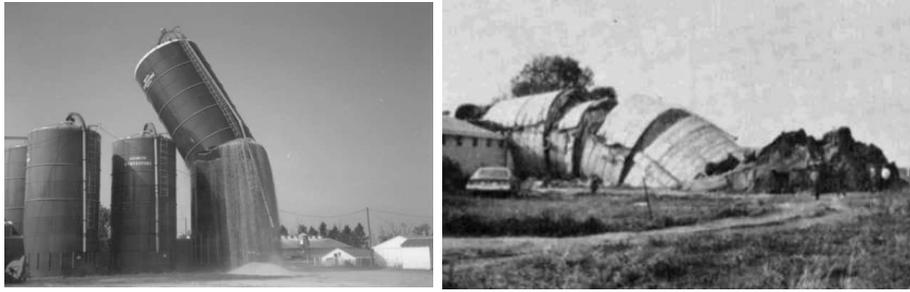
En este capítulo se presentarán los detalles teóricos para silos y tolvas que serán abordados en este trabajo. De igual manera se mencionarán algunos trabajos relevantes que han estudiado estos sistemas siendo un campo que esta en constante cambio puesto que aún no se tiene una teoría adecuada y completa para describir estos sistemas.

2.1. Silos

Frecuentemente en un proceso industrial se requiere el almacenamiento de granos tales como maíz, cemento, carbón, entre otros. Las estructuras diseñadas para el almacenamiento de granos son comúnmente llamadas *silos*, los cuales son comúnmente diseñados de metal o concreto reforzado, siendo en su mayoría cilíndricos y su base es pequeña comparada con su altura. Para su diseño se considera principalmente el tipo y las propiedades del material que almacenará (propiedades como la densidad, flujo, fricción entre granos, etc) ya que éstas determinan las cargas aplicadas sobre el silo. Las fallas en un silo son muy frecuentes, cientos de silos industriales y de granjas presentan algún grado de falla cada año. Cuando un silo falla sus consecuencias pueden ser devastadoras y de diversas formas como: pérdida del contenedor, contaminación del material que contiene, pérdida del material, limpieza, costos de reparación y más importante aún, las pérdidas de vidas humanas. Las fallas más comunes de silos son por cargas asimétricas creadas durante el llenado, almacenamiento y descarga de granos, grandes presiones no uniformes en el suelo, colapso de la estructura interna. Hay causas que afectan a la estructura pero que no están ligadas al hecho de contener materia granular; estas pueden ser explosión y combustión, corrosión del silo, deterioro del concreto

debido a ácidos, fallo por dilatación y compresión térmica en el metal de las paredes del silo, y por terremotos [11].

Las fuerzas ejercidas por los granos dentro de un silo depende de fuerzas de contacto locales, fricción entre granos y con las paredes del contenedor, la geometría del contenedor y la historia del sistema. La energía potencial gravitacional de una partícula en un silo es aproximadamente 10^{12} veces más grande que la energía térmica $k_B T$ a temperatura ambiente, por lo tanto la temperatura no interviene en las propiedades del medio granular (exceptuando los procesos generados por posible dilatación de granos), siendo éstas determinadas por detalles de como fue construido el empaquetamiento. Dentro del silo se puede crear arcos estables y vacíos tales que una carga vertical propia de la masa total de los granos puede tener un componente horizontal significativo [12]. Un reflejo de esto, es el colapso de silos como en la figura 2.1.



(a)

(b)

Figura 2.1: Colapso de silos. (a) Falla por una componente horizontal de la carga sobre la pared del silo y vacíos formados durante el llenado, almacenado y descarga; (b) falla por sobrecarga en el fondo del silo. Tomado de [13] y [11] respectivamente.

Contrario a la situación hidrostática, dentro de un silo la presión en la base no incrementa indefinidamente como la altura de la columna granular incrementa. La presión en el fondo satura a cierta altura como se muestra en la Figura 2.2. El primero en estudiar este fenómeno fue Roberts en 1884; él notó que la presión en el fondo deja de aumentar cuando la altura de la columna granular es dos veces el diámetro del círculo circunscrito en la base. En 1895, el ingeniero alemán Janssen propuso un modelo describiendo la redirección de la fuerza hacia las paredes del silo. Janssen derivó el equivalente de la fórmula barométrica para medios granulares asumiendo que las paredes cargan parte del peso [8]. El modelo descansa en tres principios:

- 1.- El medio es tratado como si fuera un continuo.
- 2.- Un esfuerzo vertical aplicado al material granular genera automáticamente un esfuerzo horizontal proporcional a este mismo, tal que $\sigma_h = K\sigma_v$; donde σ_h y σ_v son los esfuerzos horizontal y vertical sobre una capa del medio granular en el silo, y K es la constante de proporcionalidad de Janssen.
- 3.- La fuerza de fricción entre las partículas y las paredes se encuentra en el punto de la falla de Coulomb: $F_s = \mu_w F_n$, donde F_n y F_s son las magnitudes de la fuerza normal sobre las paredes y la fuerza de fricción tangencial con coeficiente de fricción estática μ_w , respectivamente.

La constante K es conocida también como “coeficiente de presión en reposo del suelo K_0 ” en el campo geotécnico y su dependencia con las características de los granos es, en general, desconocida. En la práctica la ecuación de Jaky es ampliamente usada para estimar K , relacionándola con el ángulo de fricción interno efectivo ϕ' como $K = 1 - \sin \phi'$; esta definición implica que K es única para cada tipo de material granular e independiente del estado inicial. Esta definición falla en ciertas situaciones.

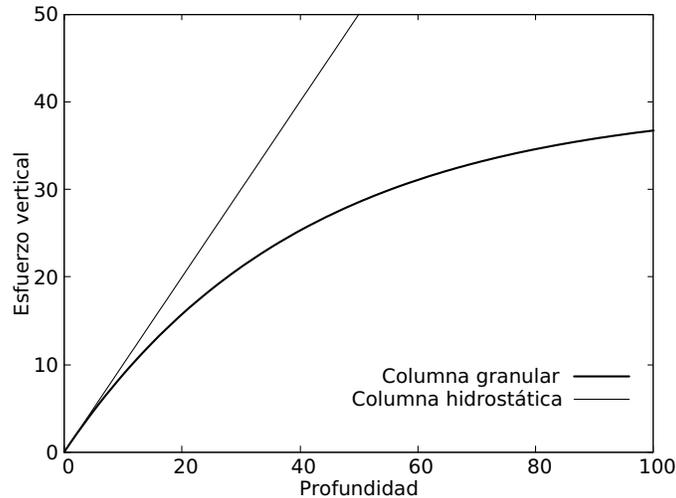


Figura 2.2: Comparación entre el comportamiento del esfuerzo vertical de una columna granular e hidrostática en función de la profundidad.

Actualmente diversos estudios han explorado los límites del modelo de Janssen, podemos mencionar el trabajo de Vanel y colaboradores [14] repor-

tando mediciones precisas y reproducibles en la presión estática en el fondo de una columna granular mostrando el límite del modelo de Janssen clásico y extendiendo por introducir una zona efectiva hidrostática en la parte superior de la columna. Por otro lado, de Gennes [4] menciona que aunque Janssen propuso una razón constante entre el esfuerzo horizontal y vertical, un sistema granular en ciertos estados de compactación mostrará una resistencia a la compresión medida por un módulo macroscópico de bulto K (la misma K de Janssen); ya que las fuerzas son mediadas por pequeñas regiones de contacto entre dos granos y el área de contacto incrementa con la presión, de igual manera K incrementará con la presión. Un medio granular bajo compresión puede ser descrito como un medio cuasi-elástico donde uno consigue $K = \nu/(1 - \nu)$ donde ν es el coeficiente de Poisson del material. En otro enfoque, Vanel y colaboradores [15] mencionaron un simple modelo hiperbólico dando un rol fundamental a las cadenas de fuerza; este modelo considera $\sigma_{rr} = \eta_1 \sigma_{zz} + \eta_2 \sigma_{rz}$ con $\eta_{1,2}$ dependiendo de la orientación de las cadenas de fuerza.

La fricción entre granos y paredes es un parámetro decisivo en el modelo de Janssen. Landry y colaboradores [16] estudiaron empaque granulares utilizando simulaciones computacionales en dos y tres dimensiones, evidenciando la zona hidrostática en la parte superior de la columna granular y encontraron que la falla de Coulomb no se cumple en el interior del empaque pero si en las paredes. Bertho y colaboradores [17] reportaron medidas en el fondo de empaques granulares en el fondo de un tubo vertical en movimiento relativo, mostrando que el empaque de granos alcanza el equilibrio dinámico independientemente del estado inicial y de la velocidad relativa con respecto a las paredes. También se ha estudiado un estado no homogéneo de fricción completamente caracterizada por una coeficiente de fricción generalizado dependiente de la profundidad [18].

El parámetro K es determinado popularmente con la prueba de compresión uniaxial, el cual es usado para medir la razón de presión lateral a vertical de diferentes granos de cereal. En estas pruebas K tiene un rango de 0.37 a 0.74 [19]. Aunque se espera que K este entre 0 y 1, se han encontrado valores más grandes que 1 en trabajos tanto experimental [20] como numéricamente [21]. En diversos trabajos [22–25] se ha analizado la dependencia de K con las propiedades del sistema, siendo aún desconocido su relación con las características de un medio granular.

2.1.1. Modelo de Janssen

En el modelo propuesto por Janssen y modificado por Lord Rayleigh se trata al medio granular como un continuo. Aunque ésta aproximación es altamente discutible en medio granulares, hace posible escribir ecuaciones diferenciales que sus soluciones describen el comportamiento de éstos con una buena exactitud.

Para poder tratar al medio granular como un continuo se tiene que considerar ciertas situaciones si se quiere tener una buena aproximación:

- Se requiere un gran número de partículas, ya que la aproximación falla cuando se tienen pocas partículas o cuando se exploran propiedades a nivel local.
- La falta de cohesión de un medio granular seco es un problema fundamental. Debido a que el medio granular es heterogéneo existen espacios intergranulares, que aunque no interactúan con los granos, si ponen restricciones sobre como puede propagarse el esfuerzo en el medio y la deformación de las partículas. De igual forma, las rotaciones individuales de las partículas representan un problema. La descripción basado en un continuo requiere que las cadenas de fuerza sean transmitidas sin interrupción, una variable como la presión solo puede ser definida si las cadenas de fuerza no están rotas y no existen rotaciones individuales de las partículas.
- La descripción basado en un continuo puede ser usada muy bien cuando los tiempos de observación son largos. Es necesario dar un tiempo de relajación amplio en materiales granulares, ya que la aproximación falla para observaciones a tiempos cortos. No es raro en el mundo de la física que los fenómenos y su descripción sean bastante diferentes dependiendo de su duración.

Consideramos un capa de espesor dh situada a una profundidad h en un contenedor de área transversal A y perímetro P . La capa esta en equilibrio bajo efecto de varias fuerzas combinadas. La presión aumenta con la profundidad ($h = 0$ en la parte superior del contenido, y $h > 0$ en el fondo). La zona de interés experimenta una fuerza hacia arriba igual a $Ad\sigma_v$, donde σ_v es la presión o esfuerzo vertical. El peso de la capa constituye una fuerza dirigida al fondo igual a $\rho gAdh$ donde g es la gravedad y ρ es la densidad volumétrica de la capa. Por último tenemos las fuerzas de fricción sobre las paredes que resulta del movimiento infinitesimal del área lateral de la capa

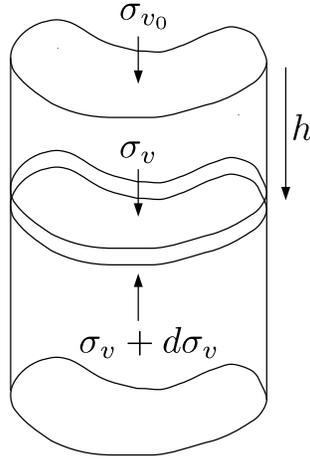


Figura 2.3: Esfuerzos verticales en una capa de espesor dh ubicada a una profundidad h de la superficie de un contenedor de área transversal A .

Pdh , es dirigida hacia arriba, y representa un valor igual a $\mu\sigma_h Pdh$. Usando la relación del esfuerzo vertical con el horizontal $\sigma_h = K\sigma_v$ obtenemos para esta fuerza de fricción $K\mu\sigma_v Pdh$, donde μ es el coeficiente de fricción entre el contenido de la capa con las paredes del contenedor. La condición de equilibrio para la capa es

$$\begin{aligned} Ad\sigma_v + K\mu P\sigma_v dh &= \rho g Adh \\ \frac{d\sigma_v}{1 - K\mu \frac{P}{\rho g A} \sigma_v} &= \rho g dh. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Ahora consideramos que en la parte superior del contenido existe un esfuerzo inicial σ_{v_0} y que la altura es $h = 0$. Integrando (2.1) obtenemos

$$\begin{aligned} -\frac{\rho g A}{K\mu P} \ln \left(1 - \frac{K\mu P}{\rho g A} \sigma_v \right) \Big|_{\sigma_{v_0}}^{\sigma_v} &= \rho g h \Big|_0^h \\ \ln \left(1 - K\mu \frac{P}{\rho g A} \sigma_v \right) &= -\frac{K\mu P}{A} h + \ln \left(1 - K\mu \frac{P}{\rho g A} \sigma_{v_0} \right) \\ 1 - K\mu \frac{P}{\rho g A} \sigma_v &= e^{-K\mu P h / A} \left(1 - K\mu \frac{P}{\rho g A} \sigma_{v_0} \right). \end{aligned}$$

Así llegamos a la forma generalizada de la ecuación de Janssen:

$$\sigma_v = \frac{\rho g A}{K\mu P} \left(1 - e^{-K\mu P h / A} \right) + \sigma_{v_0} e^{-K\mu P h / A}. \quad (2.2)$$

Si consideramos que no existe esfuerzo inicial en la superficie del contenido ($\sigma_{v_0} = 0$) conseguimos la ecuación que obtuvo Janssen originalmente:

$$\sigma_v = \frac{\rho g A}{K \mu P} \left(1 - e^{-K \mu P h / A} \right). \quad (2.3)$$

Podemos observar que para valores pequeños de h tenemos $\sigma_v \approx \rho g h$ como una presión hidrostática convencional. Cuando h es más grande que $A/(PK\mu)$, la presión vertical satura tendiendo asintóticamente a $\rho g A/(PK\mu)$ [1, 26].

Contenedor bidimensional

Para derivar la fórmula de Janssen en un contenedor bidimensional consideramos una celda como en la Figura 2.4, de longitud L , altura h y espesor ϵ . Solo existe fricción con las paredes laterales de ancho ϵ . Tomando en cuenta que el perímetro de interés es $P = 2\epsilon$ y el área transversal es $A = L\epsilon$, la relación $P/A = 2/L$; así, substituyendo en (2.3), nos queda

$$\sigma_v = \frac{\rho g L}{2K\mu} \left(1 - e^{-2K\mu h/L} \right). \quad (2.4)$$

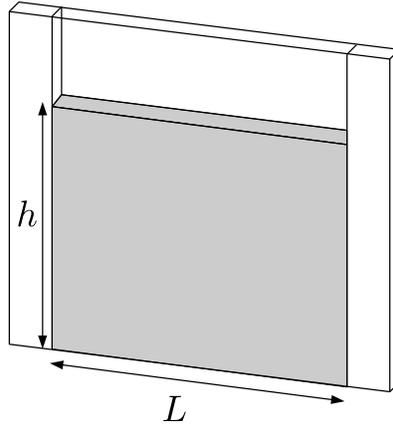


Figura 2.4: Contenedor bidimensional

2.2. Tolvas

Muchos de los procesos que se realizan en las industrias requiere de llenar, almacenar y descargar medios granulares; estos procesos están altamente automatizados, aunque son diseñados de manera empírica, y su fiabilidad depende en última instancia de una intervención manual que controle principalmente la aparición de atascos, el desarrollo de segregación, entre otros problemas. Así, en la mayoría de los procesos de dosificación de materiales granulares, desde principios activos en la industria farmacéutica hasta el mezclado de morteros en la industria de la construcción, se pueden producir grandes fluctuaciones en el volumen dispensado, lo que origina un alto grado de rechazo de la producción, con el consiguiente coste económico y pérdida de eficiencia energética [27].

El almacenamiento de granos a gran escala se realiza en silos para garantizar la continuidad en la cadena de producción, posteriormente en la descarga, el flujo de granos es controlado en general simplemente por acción de la gravedad o en ocasiones de forma combinada con cintas transportadoras. Este tipo de estrategias para el manejo del material granular no garantiza, por ejemplo, que la mezcla sea homogénea, o que se obtenga una cantidad de material con una granulometría y densidad específica. Existe bibliografía centrada en el estudio de la segregación de granos en silos, aunque se encuentra focalizada principalmente en el proceso de vaciado, mediante tolvas o boquillas, aportando (de forma muy parcial) algunas soluciones al problema de las fluctuaciones del material descargado [28, 29]. No se conoce hasta el momento una expresión que vincule las propiedades micromecánicas del material granular con su tasa de descarga o flujo a través de orificios, tanto si estos son planos como si se encuentran al final de una tolva.

Históricamente, las tolvas se han utilizado como un mecanismo de homogeneización y control de los flujos de descarga y sin embargo, no se conoce en detalles como afectan estos dispositivos a los esfuerzos que se desarrollan sobre el material manipulado. Las características del flujo son generalmente controladas por un balance entre la fuerza de gravedad, el ángulo, y la fricción existente entre la superficie y el material. Muchos experimentos de flujos en descarga de tolvas se han llevado a cabo con diferentes configuraciones, tales como variar la rugosidad del material, usando diferentes tipos de material, y estudiando la influencia en las condiciones de entrada. Las conclusiones generales de estos estudios son: 1) cuando la superficie es suave se obtiene un flujo completamente uniforme a cierto ángulo de inclinación crítico; 2) cuando el material es rugoso se observan flujos acelerados a ángulos de inclinación pronunciados, y 3) existe un gran rango de inclinación de

las paredes donde se observa un flujo estable uniforme [30].

2.2.1. Flujo granular

En la descarga de material granular se pueden distinguir principalmente dos tipos de flujo: flujo de embudo y flujo másico [13]. El flujo de embudo o flujo interno es generalmente definido como un patrón de flujo en el que algo del material es estacionario mientras que el resto se encuentra en movimiento. En contraste, el flujo másico es generalmente definido como un patrón de flujo en el que todo el material está en movimiento, notando que no se requiere que la distribución de velocidades sea uniforme puesto que los granos en el centro tienen velocidades generalmente más grandes que los granos cerca de las paredes del contenedor. En los sistemas reales es común observar una combinación de estos dos flujos, considerándose como un flujo mixto. En la Figura 2.5 se presenta un esquema de los tres distintos patrones de flujo.

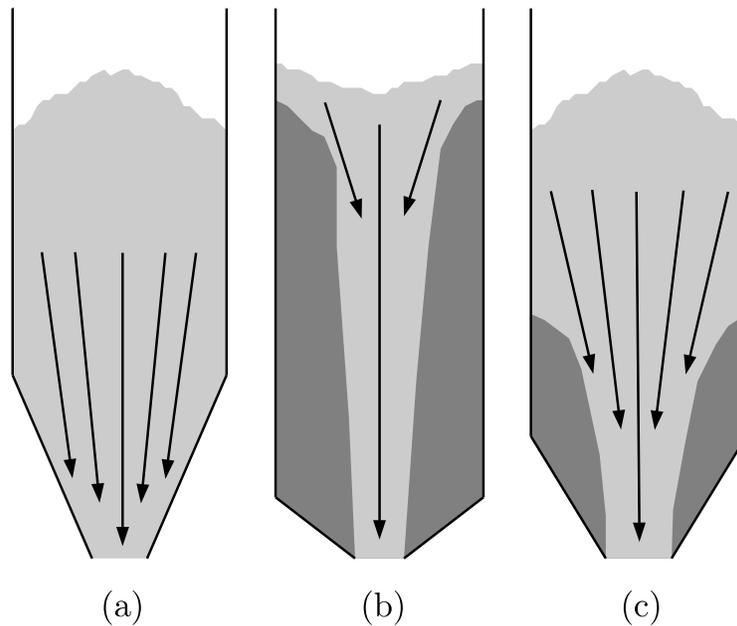


Figura 2.5: Esquema de tres patrones de flujo: (a) flujo másico, (b) flujo de embudo y (c) flujo mixto. El color más oscuro representa la parte del material que está prácticamente estático.

Relación de correlación de Beverloo

En 1961, W. A. Beverloo y colaboradores [31] obtuvieron una expresión para el flujo de granos a través de un orificio. Esta expresión se basa en un análisis dimensional donde se presupone que el flujo Q depende de parámetros relevantes como son el diámetro del orificio D , la densidad aparente ρ_b del material, la aceleración g de la gravedad y el coeficiente de fricción μ entre partículas; experimentalmente, se sabe que la influencia del diámetro del contenedor y la altura del material granular es despreciable para el flujo, excepto cuando el contenedor esta cerca de vaciarse. Considerando que la función se puede descomponer en el producto de potencias de estos parámetros podemos escribir

$$Q = C(\mu)D^a\rho_b^b g^c, \quad (2.5)$$

donde C es una función del coeficiente de fricción sin unidades. Realizando el análisis dimensional obtenemos que las unidades de (2.5) son

$$[MT^{-1}] = [L]^a[ML^{-3}]^b[LT^{-2}]^c; \quad (2.6)$$

esto lleva a que los exponentes sean $a = 5/2$, $b = 1$ y $c = 1/2$. Sin embargo, al graficar $Q^{2/5}$ en función de D para los datos experimentales se observa que la intersección con el eje D no se da en cero sino que a cierta apertura de orificio de descarga deja de haber flujo; se encontró que esta apertura es proporcional al diámetro de los granos d , por lo tanto la “ley de Beverloo” queda expresada como

$$Q = C\rho_b\sqrt{g}(D - kd)^{5/2}, \quad (2.7)$$

donde k es un parámetro de proporcionalidad y C es suficientemente constante como para considerar que es independiente de μ ; el término $D - kd$ puede considerarse como un diámetro de orificio efectivo siendo menor al D real debido a que el centro de masa de los granos no puede tocar el borde del orificio.

Aunque esta expresión empírica es ampliamente usada, aún no se conoce la dependencia de C y k con las propiedades del sistema, generalmente C esta alrededor de 0.58 y k alrededor de 1.5. Actualmente se han propuesto diversas modificaciones al modelo, un trabajo destacable es el de C. Mankoc y colaboradores [32], en donde proponen introducir un término exponencial que estaría relacionado con la densidad aparente en una zona cercana al orificio; ellos obtuvieron un buen ajuste con sus datos experimentales para un amplio rango de diámetros de apertura, reproduciendo el flujo tanto para

aperturas muy pequeñas como muy grandes que es donde la expresión de Beverloo no logra ajustarse bien.

La expresión de Beverloo no es aplicable para tolvas cónicas, ya que el efecto del semi-ángulo α del cono llega a ser importante. Esta contribución puede ser agregada con la correlación de Rose y Tanaka (1956), donde el flujo es proporcional a una función $F(\alpha, \phi_d)$, donde ϕ_d es el ángulo entre la zona estancada del material y la horizontal. La expresión para el flujo queda como

$$Q = Q_B F(\alpha, \phi_d), \quad (2.8)$$

donde Q_B es el flujo de Beverloo presentado en la ecuación (2.7). La función F es dada por $(\tan \alpha \tan \phi_d)^{-0.35}$ cuando $\alpha < \pi/2 - \phi_d$, y es $F = 1$ cuando $\alpha > \pi/2 - \phi_d$. El ángulo ϕ_d es una cantidad que debe ser determinada experimentalmente, generalmente tiene un valor de $\pi/4$.

Arco de caída libre

Además del trabajo de Beverloo, se han desarrollado algunas predicciones teóricas sobre el flujo granular en tolvas. Las ideas de tales predicciones fueron basadas en el concepto presentado por Brown y Richards en 1961 [9] llamado “arco de caída libre (free-fall arch)”. Este arco es una superficie esférica bien definida donde la disipación de energía disminuye a un mínimo. Arriba de este arco se considera que los granos están en contacto con lo cual existe un esfuerzo intergranular; debajo del arco, los granos pierden el contacto y caen libremente por acción de la gravedad. Aunque este concepto es coherente con el flujo de Beverloo, implica una inconsistencia al asumir una discontinuidad de esfuerzo, ya que se considera que en el arco de caída libre el esfuerzo cae a cero, lo cual es difícil de justificar.

El análisis es basado en un flujo radial en una tolva cónica. La velocidad radial será inversamente proporcional a r^2 y las otras componentes de la velocidad serán cero, esto es

$$v_r = -\frac{f(\theta)}{r^2}, \quad (2.9)$$

donde $f(\theta)$ es una función del ángulo θ el cual va de cero al semi-ángulo del cono α ; el signo menos es por que el flujo es decreciente en la dirección de r . La energía total T por unidad de masa del material es dado por analogía con la ecuación de Bernoulli como

$$T = \frac{\sigma}{\rho_b} + \frac{v_r^2}{2} + gr \cos \theta. \quad (2.10)$$

Como existe fricción en el material, se asume que T disminuye en la dirección del flujo, por lo tanto dT/dr debe ser positivo. También se asume que el esfuerzo σ es constante cerca del orificio, siendo esto basado en el análisis de Janssen. Sin embargo, esto no es verdad ya que σ debe tender a cero cerca del orificio; el esfuerzo parece variar linealmente con r .

Sustituyendo (2.9) en (2.10) obtenemos

$$\frac{dT}{dr} = -\frac{2f^2(\theta)}{r^5} + g \cos \theta \geq 0. \quad (2.11)$$

Brown y Richards asumieron que $dT/dr = 0$ en el arco de caída libre el cual es la superficie esférica de radio r_0 tapando el orificio; para un orificio de diámetro D y una tolva con un semi-ángulo α , tenemos que $r_0 \sin \alpha = D/2$. Por lo tanto, de la ecuación (2.11) podemos obtener

$$f(\theta) = \left(\frac{r_0^5 g \cos \theta}{2} \right)^{1/2} = \left(\frac{D^5 g \cos \theta}{2^6 \sin^5 \alpha} \right)^{1/2}. \quad (2.12)$$

Así el flujo de masa Q puede ser obtenido por integrar la ecuación (2.12)

$$Q = 2\pi\rho_b \int_0^\alpha f(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{\pi}{6} \rho_b \sqrt{g} D^{5/2} \left(\frac{1 - \cos^{3/2} \alpha}{\sin^{5/2} \alpha} \right). \quad (2.13)$$

Como se hizo anteriormente, el diámetro del orificio se sustituye por un diámetro efectivo tal que (2.13) queda

$$Q = C' \rho_b \sqrt{g} (D - kd)^{5/2}, \quad (2.14)$$

donde

$$C' = \frac{\pi}{6} \left(\frac{1 - \cos^{3/2} \alpha}{\sin^{5/2} \alpha} \right). \quad (2.15)$$

Esta teoría de mínima energía tiene éxito al predecir el flujo másico, sin embargo falla en la predicción de perfiles de velocidad, lo cual es una paradoja que es debatida actualmente [26]. La existencia del arco de caída libre es controversial así como la discontinuidad del esfuerzo en ese arco. Rubio-Largo y colaboradores [33] demostraron la existencia de una transición bien definida del esfuerzo cinético en una posición que escala con tamaño del orificio de forma experimental en un silo cuasi-bidimensional y numérica en un silo cilíndrico tridimensional; igualmente evidenciaron que el “arco” donde se encuentra la transición del esfuerzo cinético es parabólico modificando el concepto del arco de caída libre.

La velocidad v_c por la que pasan las partículas en el centro del orificio de un silo en descarga ($\alpha = \pi/2$) es la velocidad en caída libre desde una distancia igual al radio R de apertura del orificio ($r_0 \sin(\pi/2) = D/2 = R = r_0$) medido desde el orificio, siendo obtenida como

$$\int_0^\infty a dz = \int_{v_c}^0 v dv \quad (2.16)$$

$$Rg \int_0^\infty \frac{a}{g} \frac{dz}{R} = \frac{1}{2} v_c^2 \quad (2.17)$$

$$v_c = \sqrt{2gR} \left(\int_0^\infty \frac{a}{g} \frac{dz}{R} \right)^{1/2} = \sqrt{2g\gamma R}. \quad (2.18)$$

donde a y v son la aceleración y velocidad del grano, z la distancia vertical medida desde el orificio de descarga, y γ es el área debajo del perfil de aceleración. En la teoría del arco de caída libre, la aceleración de las partículas es cero antes del arco e igual a g después del arco; esto quiere decir que $\gamma = 1$ siendo el perfil de aceleración una función escalón. Sin embargo, en el trabajo anteriormente mencionado [33] hacen evidente que el perfil de aceleración en el centro del orificio es decreciente y que sus valores cerca del orificio son ligeramente más grandes que g como se puede notar en la Figura 2.6 de donde obtuvieron $\gamma > 1$. Ésto podría significar que los granos son impulsados hacia abajo por un sistema que aún se encuentra con algo de compresión después del arco, contrario a esta teoría de mínima energía.

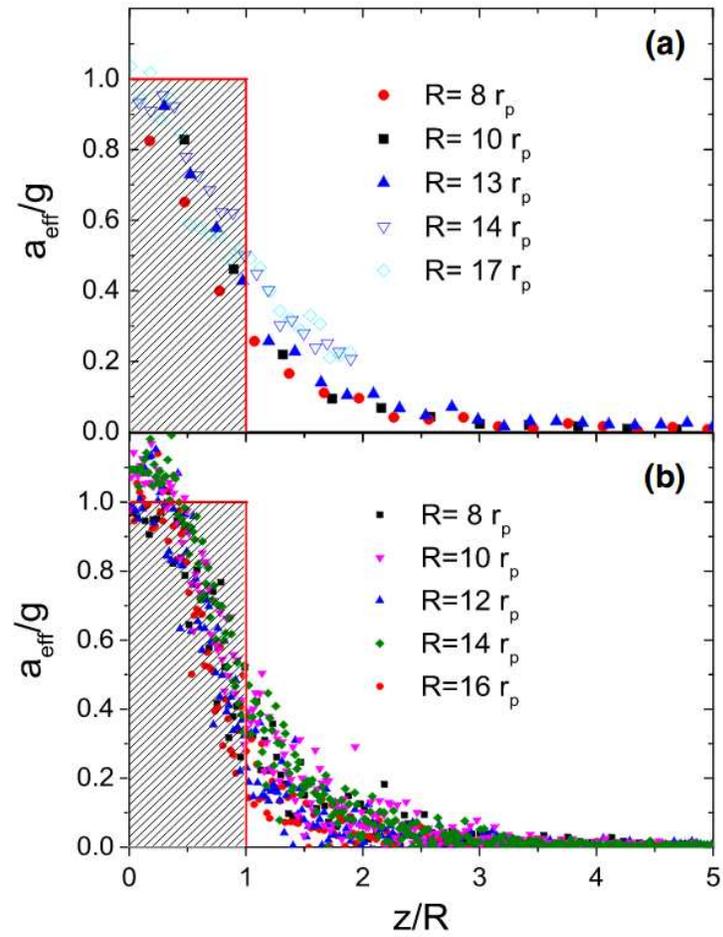


Figura 2.6: Aceleración efectiva normalizada por la gravedad g como función de la distancia vertical escalada z/R en (a) un silo 2D experimental y (b) un silo 3D simulado. La región sombreada es la función Heaviside compatible con la idea del arco de caída libre. Tomado de [33]

Capítulo 3

Metodología

Para el estudio numérico de medios granulares es común utilizar el método de elementos discretos (DEM por sus siglas en inglés), siendo un método robusto con la posibilidad de implementar cálculos en paralelo. Es un método determinista con las ventajas de acceder directamente a las fuerzas de contacto, velocidades y posiciones en cada paso del tiempo de simulación discretizado.

Por otro lado, para el análisis de esfuerzos en medios granulares es utilizado comúnmente el método de grano grueso (coarse graining), el cuál se basa en realizar una distribución continua de propiedades discretas.

En este capítulo se expondrá la teoría y los conceptos más importantes de ambos métodos utilizados en este trabajo de investigación.

3.1. Método de elementos discretos

Los medios granulares consisten de un gran número de partículas que interactúan vía fuerzas de corto rango, es decir, solo contacto mecánico; las fuerzas de largo alcance como la electrostática no son consideradas. La dinámica del medio granular es descrita por las ecuaciones de movimiento de Newton y las fuerzas de contacto entre granos. Por lo tanto las ecuaciones de movimiento para un grano α de masa m_α ubicado en una posición \mathbf{r}_α con un desplazamiento angular φ_α con respecto a los ejes principales de su tensor de inercia $\hat{\mathbf{I}}_\alpha$, serán

$$\frac{d\mathbf{p}_\alpha}{dt} = \mathbf{F}_\alpha = \sum_{\beta} \mathbf{F}_{\alpha\beta} + \mathbf{F}_{\text{ext}}, \quad (3.1)$$

$$\frac{d\mathbf{L}_\alpha}{dt} = \mathbf{T}_\alpha = \sum_{\beta} \mathbf{T}_{\alpha\beta} + \mathbf{T}_{\text{ext}}; \quad (3.2)$$

donde $\mathbf{p}_\alpha = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}$ es el momento lineal, $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{I}}_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha$ es el momento angular con $\boldsymbol{\omega}_\alpha$ como velocidad angular, y \mathbf{F}_α y \mathbf{T}_α son la fuerza y el torque actuando sobre el grano α . \mathbf{F}_α es igual a la suma de todas las fuerzas de interacción entre el grano α y cada grano en contacto β , más las fuerzas externas \mathbf{F}_{ext} actuando sobre el grano α , como la gravedad y las paredes. De igual manera con el torque \mathbf{T}_α .

Las propiedades dinámicas y estáticas de un sistema granular son afectadas por la interacción de los granos con las fronteras del sistema. Un método muy eficiente es construir la pared como partículas que obedecen las mismas reglas de interacción que las del material granular, pero cuya dinámica no es determinada por las ecuaciones de Newton (básicamente partículas estáticas).

Una vez definidas las fronteras del sistema, las propiedades, las posiciones y las velocidades iniciales de los granos se procede a una serie de pasos iterativos:

- 1.- Se calculan las fuerzas y los torques para cada grano, siendo la parte central de la simulación y es donde se consume la mayor parte del tiempo de computo.
- 2.- Se prosigue a integrar las ecuaciones de movimiento expuestas en (3.1) y (3.2) para obtener las trayectorias y velocidades de los granos.
- 3.- Se avanza un paso en el tiempo.
- 4.- Por último se extraen los datos de interés pasado cada cierto número de pasos de tiempo.

A continuación se expondrán los modelos de fuerza y, el método de integración utilizados en este trabajo. Si se desea conocer más detalles acerca de este método y otros métodos de simulación se recomienda acudir a [34–36].

3.1.1. Fuerzas de contacto

Consideramos un sistema de granos esféricos (discos en dos dimensiones) secos no cohesivos, de tal forma que existen tres grados de libertad traslacionales (dos en dos dimensiones) y tres rotacionales (uno en dos dimensiones). El contacto general entre dos granos de radio R_α y R_β , posiciones \mathbf{r}_α y \mathbf{r}_β , velocidades lineales \mathbf{v}_α y \mathbf{v}_β , y velocidades angulares $\boldsymbol{\omega}_\alpha$ y $\boldsymbol{\omega}_\beta$ es mostrado en la figura 3.1, mencionando que para el propósito ilustrativo se ha exagerado el contacto (traslape) y con el punto de contacto $C_{\alpha\beta}$ definido en el centro de la zona de traslape. No esta demás mencionar igualmente que debido a la simetría de la geometría considerada es irrelevante considerar los desplazamientos angulares de los granos.

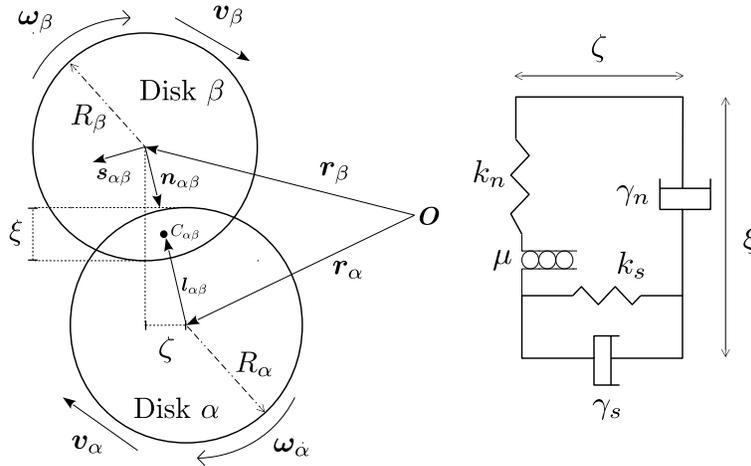


Figura 3.1: Diagrama de una colisión de dos granos y el esquema de fuerzas de contacto utilizado.

En general, cuando dos esferas impactan sufren una deformación que se encontrara entre los extremos de un choque perfectamente elástico y un choque perfectamente inelástico; parte de la energía en la colisión es disipada en forma de calor, ondas de sonido, creación de fracturas, etc. Por lo tanto, para modelar la fuerza de contacto entre dos materiales viscoelásticos necesitamos una parte de repulsión y otra de disipación. Igualmente, descomponemos esta fuerza en un componente normal y uno tangencial, $\mathbf{F}_{\alpha\beta} = \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_s$, al área

de contacto.

Componente normal

Podemos describir la fuerza normal \mathbf{F}_n sencillamente por una combinación lineal de un resorte y un amortiguador para representar la componente elástica y viscosa respectivamente. La dirección de la fuerza será dada por el vector normal unitario

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha}{|\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha|}. \quad (3.3)$$

La magnitud de la fuerza normal queda modelada como

$$F_n = \text{mín}(0, -\kappa_n \xi - \gamma_n v_n), \quad (3.4)$$

donde la función mínimo es debido a que la fuerza siempre es repulsiva, ξ es un “traslape virtual” que parametriza la deformación de los granos el cual es dado por

$$\xi = \max(0, R_\alpha + R_\beta - |\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha|), \quad (3.5)$$

y $v_n = \dot{\xi} = \mathbf{v}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}$ es la componente normal de la velocidad relativa al punto de contacto ubicado en $\mathbf{r}_{C_{\alpha\beta}}$. Esta velocidad puede ser obtenida por

$$\mathbf{v}_{\alpha\beta} = \mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha + \boldsymbol{\omega}_\beta \times (\mathbf{r}_{C_{\alpha\beta}} - \mathbf{r}_\beta) - \boldsymbol{\omega}_\alpha \times (\mathbf{r}_{C_{\alpha\beta}} - \mathbf{r}_\alpha). \quad (3.6)$$

Este modelo es referido como “*spring-dashpot*” y tiene la ventaja que su solución analítica permite calcular cantidades importantes. Las condiciones iniciales, en el tiempo $t = 0$, son cuando se establece el contacto; la deformación empieza en cero y el grano tiene una rapidez normal inicial, esto es, $\xi(0) = 0$ y $\dot{\xi}(0) = v_n^{\text{inicial}}$. La solución a la ecuación diferencial (3.4) con $F_n = m^* \ddot{\xi}$ será

$$\xi(t) = \frac{v_n^{\text{inicial}}}{2\pi f} \exp\left(-\frac{\gamma_n^2}{2m^*} t\right) \sin(2\pi f t), \quad (3.7)$$

donde $m^* = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta)$ es la masa reducida y f es la frecuencia de oscilación. La deformación inicia en cero, crece hasta un valor máximo y decrece nuevamente hasta cero cuando ya no habrá contacto, por lo tanto el tiempo que dura el contacto, es decir el tiempo de colisión t_{col} , es la mitad del período de oscilación dado por

$$t_{\text{col}} = \frac{1}{2f} = \pi \left[\frac{\kappa_n}{m^*} - \left(\frac{\gamma_n}{2m^*} \right)^2 \right]^{-1/2}. \quad (3.8)$$

Fenomenológicamente, la elasticidad del impacto es descrita por el coeficiente de restitución normal e_n , el cual, es la razón de la rapidez normal final v_n^{final} con la rapidez normal inicial v_n^{inicial} de impacto. La derivada de (3.7) evaluada en el tiempo de colisión nos dará la rapidez normal final de impacto, por lo que podemos obtener el coeficiente de restitución por

$$e_n = -\frac{v_n^{\text{final}}}{v_n^{\text{inicial}}} = -\frac{\dot{\xi}(t_{\text{col}})}{\dot{\xi}(0)} = \exp\left(-\frac{\gamma_n^2}{2m^*}t_{\text{col}}\right). \quad (3.9)$$

De esta forma podemos ajustar las constantes κ_n y γ_n con los correspondientes valores experimentales de e_n y t_{col} exhibidos en un material en un rango de velocidades relevante para la simulación. Estas constantes estarán dadas por

$$\gamma_n = -\frac{2m^* \ln e_n}{t_{\text{col}}}, \quad (3.10)$$

$$\kappa_n = \frac{m^*}{t_{\text{col}}^2} [\pi^2 + (\ln e_n)^2]; \quad (3.11)$$

Una simulación suficientemente precisa se puede obtener con un paso en el tiempo de $\Delta t \approx t_{\text{col}}/100$. La ventaja de la fuerza (3.4) es que no tiene parámetros libres, por lo que κ_n y γ_n son configuradas al inicio de la simulación y se mantienen constantes en toda la simulación [37].

Componente tangencial

En general, la fuerza tangencial \mathbf{F}_s esta conectada con la fuerza normal por la ley de fricción de Coulomb, esto es $F_s \leq \mu_s F_n$ antes de haber deslizamiento (fricción estática) y $F_s = \mu_d F_n$ cuando existe deslizamiento (fricción dinámica), con μ_s y μ_d como coeficientes de fricción estática y dinámica respectivamente siendo $\mu_s \geq \mu_d$. Sin embargo se necesita una forma numérica simple para introducir fricción estática en un código de simulación. Una opción que va acorde con el experimento es presentar un esquema de fuerza que tome en cuenta una elasticidad tangencial, necesaria para sistemas estáticos o cuasi-estáticos. La elasticidad tangencial fue introducida en simulaciones por primera vez por Cundall y Strack [38]. Sin embargo este modelo presenta oscilaciones tangenciales, así que para evitar esto se considera de igual manera un amortiguamiento tangencial. De esta manera la fuerza de fricción estática es modelada como

$$\mathbf{F}_s^e = -\kappa_s \boldsymbol{\zeta} - \gamma_s \mathbf{v}_s \quad (3.12)$$

donde κ_s es la rigidez del resorte tangencial, γ_s es un parámetro de disipación, ζ es un desplazamiento virtual de un resorte tangencial, y \mathbf{v}_s es la velocidad tangencial relativa definida como $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{\alpha\beta} - \dot{\xi} \cdot \mathbf{n}$. Esta descripción de la fuerza tangencial será válida mientras su magnitud no exceda $\mu_s F_n$.

La magnitud del desplazamiento virtual tangencial del resorte es definido por

$$\zeta = \zeta_o + \int_{t_o}^t v_s dt' \quad (3.13)$$

donde ζ_o es la magnitud del desplazamiento calculado en un tiempo anterior t_o (en el caso de que el contacto este iniciando configuramos $t_o = 0$ y $\zeta_o = 0$).

El detalle fundamental aquí es que ζ_o y \mathbf{v}_s no son necesariamente coplanares en tres dimensiones. En un sistema de dos dimensiones el contacto entre granos siempre ocurre a lo largo de una línea; no tendríamos problemas con usar (3.13). En cambio, en tres dimensiones el contacto entre granos ocurre en un plano que es perpendicular al vector normal unitario \mathbf{n} , sin embargo este vector no permanece constante en el tiempo y por consiguiente el plano cambia de acuerdo a la rotación de \mathbf{n} . Por lo tanto, antes de actualizar el desplazamiento tangencial ζ tendríamos que rotar ζ_o alrededor de un vector definido por $\mathbf{u} = (\mathbf{n}_o \times \mathbf{n})/|\mathbf{n}_o \times \mathbf{n}|$, donde \mathbf{n}_o es el vector unitario normal en un tiempo anterior. El ángulo de rotación puede ser obtenido por $d\Omega = \arcsin(|\mathbf{n}_o \times \mathbf{n}|)$ y la rotación quedará definida con la fórmula de rotación de Rodrigues

$$\zeta'_o = \zeta_o \cos d\Omega + (\mathbf{u} \times \zeta_o) \sin d\Omega + \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \zeta_o)(1 - \cos d\Omega). \quad (3.14)$$

Podemos hacer la consideración de que el ángulo de rotación es muy pequeño, de tal forma que $\cos d\Omega \approx 1$, $\sin d\Omega \approx d\Omega$ y $d\Omega = d\Omega \mathbf{u} = \mathbf{n}_o \times \mathbf{n}$. De esta forma la rotación infinitesimal será

$$\zeta'_o = \zeta_o + d\Omega \times \zeta_o. \quad (3.15)$$

Ya rotado el desplazamiento tangencial anterior podemos actualizarlo un paso en el tiempo Δt .

$$\zeta = \zeta'_o + \mathbf{v}_s \Delta t. \quad (3.16)$$

Una vez que la fricción estática alcance el límite $\mu_s F_n$ configuramos la fuerza de fricción dinámica como

$$\mathbf{F}_s^d = \mu_d F_n \mathbf{s}, \quad (3.17)$$

y el desplazamiento tangencial es configurado a una longitud consistente con la condición de Coulomb

$$\zeta = -\frac{1}{\kappa_s} (\mathbf{F}_s^d + \gamma_s \mathbf{v}_s); \quad (3.18)$$

donde $\mathbf{s} = \mathbf{F}_s^e / F_s^e$ es el vector unitario tangencial. En la siguiente iteración se calcula la fuerza utilizando (3.12), si $F_s^e \geq \mu_d F_n$ entonces se sigue utilizando la fricción dinámica actualizando su dirección \mathbf{s} y ajustando ζ con (3.17) y (3.18). Si por el contrario $F_s^e < \mu_d F_n$ se regresa a la fricción estática y se vuelve a evaluar la condición $F_s^e \leq \mu_s F_n$ como cambio de fricción estática a dinámica.

Sin embargo es común utilizar el mismo coeficiente de fricción estática ($\mu_s = \mu_d = \mu$), por lo que el límite del régimen estático será la fricción dinámica. Las constantes de resorte y amortiguamiento son ajustadas para que las oscilaciones tangenciales y normales tengan el mismo período, para discos se suele usar la relación $\kappa_s / \kappa_n = 1/3 = \gamma_s / \gamma_n$, y en el caso de esferas se suele utilizar $\kappa_s / \kappa_n = 2/7$; estas relaciones se pueden configurar para ajustar las simulaciones a datos observados experimentalmente [39–41].

3.1.2. Integración de las ecuaciones de movimiento

El siguiente paso es integrar las ecuaciones de movimiento. Existen diversos algoritmos para integrarlas, pero en la práctica solo unos cuantos son relevantes. El cálculo de fuerzas conlleva tiempo de cómputo, por lo que el algoritmo de integración debería evaluar las ecuaciones una vez cada iteración, eso deja fuera varios algoritmos como los métodos de Runge-Kutta de ordenes superiores. Los algoritmos restantes se pueden dividir en dos grupos: los métodos *Verlet* y relacionados, y la familia *Gear* de fórmulas *predictor-corrector*. Los algoritmos de estos grupos usados más frecuentemente son: *Velocity-Verlet*, *Beeman*, y *Gear sixth-order*. La exactitud de estos tres métodos es similar, la diferencia más grande es en el momento del contacto o cuando deja de haberlo. Una precisión alta no representa una mejora debido a que las fuerzas descritas entre granos son discontinuas o tienen derivadas divergentes en el momento del contacto (o justo cuando deja de haberlo) para cualquier impacto con velocidad diferente de cero. Esto genera un error grande en el tiempo de contacto que anula cualquier precisión ganada con los métodos de orden superior.

El método *Velocity-Verlet* modifica las variables del espacio fase sobre un paso en el tiempo dt usando

$$\mathbf{r}(t + dt) = \mathbf{r}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t)dt + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{r}}(t)dt^2 + \mathcal{O}(dt^3), \quad (3.19)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}(t + dt) = \frac{1}{m}\mathbf{F}(\mathbf{r}(t + dt)), \quad (3.20)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t + dt) = \dot{\mathbf{r}}(t) + \frac{1}{2}[\ddot{\mathbf{r}}(t + dt) + \ddot{\mathbf{r}}(t)]dt + \mathcal{O}(dt^3), \quad (3.21)$$

Este algoritmo es auto-inicializado, es decir, no necesita información sobre los valores de las variables en tiempos previos o los valores de las derivadas superiores. Es simpléctico en ausencia de disipación. Es muy usado y fácil de programar. Sin embargo, el algoritmo no es correcto para fuerzas dependientes de la velocidad, como es nuestro caso en simulaciones de medios granulares. La solución más simple es incluir un paso *predictor* a la velocidad para mejorar la evaluación de la aceleración [34, 42] dado por

$$\mathbf{r}(t + dt) = \mathbf{r}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t)dt + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{r}}(t)dt^2, \quad (3.22)$$

$$\dot{\mathbf{r}}_p(t + dt) = \dot{\mathbf{r}}(t) + \ddot{\mathbf{r}}(t)dt, \quad (3.23)$$

$$\boldsymbol{\omega}_p(t + dt) = \boldsymbol{\omega}(t) + \dot{\boldsymbol{\omega}}(t)dt, \quad (3.24)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}(t + dt) = \frac{1}{m}\mathbf{F}(\mathbf{r}(t + dt), \dot{\mathbf{r}}_p(t + dt), \boldsymbol{\omega}_p(t + dt)), \quad (3.25)$$

$$\dot{\boldsymbol{\omega}}(t + dt) = \frac{1}{I}\mathbf{T}(\mathbf{r}(t + dt), \dot{\mathbf{r}}_p(t + dt), \boldsymbol{\omega}_p(t + dt)), \quad (3.26)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t + dt) = \dot{\mathbf{r}}_p(t) + \frac{1}{2}[\ddot{\mathbf{r}}(t + dt) - \ddot{\mathbf{r}}(t)]dt, \quad (3.27)$$

$$\boldsymbol{\omega}(t + dt) = \boldsymbol{\omega}_p(t) + \frac{1}{2}[\dot{\boldsymbol{\omega}}(t + dt) - \dot{\boldsymbol{\omega}}(t)]dt, \quad (3.28)$$

conservando hasta términos de segundo orden en dt y considerando las aceleraciones y velocidades angulares (debido a la geometría las rotaciones en el caso de esferas o discos no tienen sentido). Para la integración solo se introduce la posición, velocidad y aceleración iniciales.

3.2. Método de grano grueso

El método de grano grueso es una herramienta para representar una dinámica de partículas discretas en campos macroscópicos continuos. Los primeros esfuerzos para aplicar el método a medios granulares fue hecho por Weber en 1966, de ahí en adelante se expusieron diversos trabajos sobre el tema, sin embargo fue popularizado por Goldhirsch y colaboradores en 2001 [43]. La meta del grano grueso es producir ecuaciones de movimiento continuas desde una dinámica microscópica. El primer paso es escoger y definir un conjunto de campos continuos de acuerdo a las ecuaciones de movimiento deseadas. Los campos deben estar definidos en todos lados del sistema y no solo en el centro de masa de las partículas o solamente en el interior de ellas. Se requiere una escala (o resolución) de grano grueso espacial y temporal, la cual es importante para obtener campos suaves y relaciones constitutivas.

Consideremos un número finito o infinito de partículas, para una partícula α tenemos su masa m_α , la posición de su centro de masa $\mathbf{r}_\alpha(t)$ y su velocidad $\mathbf{v}_\alpha(t) = \dot{\mathbf{r}}_\alpha(t)$ en un instante de tiempo t . También definimos la posición relativa entre dos partículas α y β como $\mathbf{r}_{\alpha\beta}(t) = \mathbf{r}_\alpha(t) - \mathbf{r}_\beta(t)$, y la fuerza ejercida por β sobre α es $\mathbf{F}_{\alpha\beta}(t)$, siendo $\mathbf{F}_\alpha(t) = \sum_\beta \mathbf{F}_{\alpha\beta}(t)$. En algunas partes del siguiente desarrollo se obviará la dependencia temporal de los vectores posición, velocidad y fuerza. Consideramos \mathbf{r} como un punto en el espacio donde escogemos medir una entidad física y no depende del tiempo, sin embargo los campos dependen tanto de \mathbf{r} como del tiempo t . En simulaciones numéricas los campos están definidos en un conjunto discreto de puntos (formando una malla). El método aquí descrito esta basado en el trabajo de Goldhrisch [44].

3.2.1. Ecuación de continuidad

La densidad de masa microscópica en un punto \mathbf{r} en un tiempo t es definida por

$$\rho^{\text{mic}}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)), \quad (3.29)$$

donde δ es la función delta de Dirac. Esta definición cumple con el requerimiento de que su integral sobre todo el espacio es igual a la masa contenida, sin embargo es singular. Para obtener una densidad de masa no singular podemos definir

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)), \quad (3.30)$$

donde ϕ es una función de grano grueso la cual posee un predeterminada ventana w (escala o resolución), y debe ser real, positiva y normalizable, por ejemplo la función Heaviside. Es más utilizada la función Gaussiana de ancho w puesto que genera campos suaves y las integrales pueden ser calculadas analíticamente.

Ahora derivamos la ecuación de continuidad utilizando la densidad de

masa definida arriba y haciendo uso de la regla de la cadena quedando

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
&= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \left(-\dot{\mathbf{r}}_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial r_i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial r_i} \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
&= -\frac{\partial p_i(\mathbf{r}, t)}{\partial r_i} \equiv -\nabla \cdot \mathbf{p}(\mathbf{r}, t), \tag{3.31}
\end{aligned}$$

donde i (y posteriormente j) denota el componente vectorial (se ha usado la convención de suma de Einstein), y se ha definido la densidad de momento de grano grueso por

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)). \tag{3.32}$$

El campo de velocidad de grano grueso queda definido como

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)}, \tag{3.33}$$

donde podemos sustituirlo en (3.31) y obtener la forma estandar de la ecuación de continuidad $\dot{\rho} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V})$.

3.2.2. Ecuación de conservación del momento

De forma similar podemos obtener la ecuación del momento. Tomando la derivada temporal de la densidad de momento de grano grueso

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
&= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \dot{v}_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha i} \frac{\partial \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})}{\partial t} \\
&= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \dot{v}_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial r_j} \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha i} v_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}). \tag{3.34}
\end{aligned}$$

Primero desarrollaremos el primer término de (3.34) donde consideramos la segunda ley de Newton y que la fuerza en la partícula α es la suma de todas

las contribuciones de otras partículas β sobre esa partícula. Obteniendo

$$\begin{aligned}
 A &\equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} \dot{v}_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= \sum_{\alpha} F_{\alpha i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} F_{\alpha \beta i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= \sum_{\alpha \beta} F_{\alpha \beta i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \tag{3.35}
 \end{aligned}$$

$$= - \sum_{\alpha \beta} F_{\alpha \beta i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta}), \tag{3.36}$$

donde el último término es la tercera ley Newton (α y β en la suma son variables mudas por lo que se pueden intercambiar). Utilizando (3.35) y (3.36) podemos obtener

$$A = \frac{1}{2} 2A = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta} F_{\alpha \beta i} [\phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) - \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta})]. \tag{3.37}$$

La siguiente identidad se mantiene para cualquier función suave

$$\begin{aligned}
 \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta}) - \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) &= \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} + s\mathbf{r}_{\alpha\beta}) ds \\
 &= \int_0^1 ds r_{\alpha\beta j} \frac{\partial}{\partial r_j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} + s\mathbf{r}_{\alpha\beta}) \\
 &= r_{\alpha\beta j} \frac{\partial}{\partial r_j} \int_0^1 \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} + s\mathbf{r}_{\alpha\beta}) ds. \tag{3.38}
 \end{aligned}$$

Substituyendo (3.38) en (3.37) obtenemos

$$A = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r_j} \sum_{\alpha \beta} F_{\alpha \beta i} r_{\alpha\beta j} \int_0^1 \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} + s\mathbf{r}_{\alpha\beta}) ds. \tag{3.39}$$

Antes de seguir con el segundo término en (3.34), es conveniente definir la fluctuación de la velocidad de la partícula α en el tiempo t :

$$\mathbf{v}'_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{v}_{\alpha}(t) - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t). \tag{3.40}$$

De la definición anterior podemos obtener la siguiente igualdad

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}'_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{V}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) - \mathbf{V} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= \mathbf{p} - \rho \mathbf{V} = \mathbf{0}.
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

El segundo término en (3.34) puede ser reescrito como

$$\begin{aligned}
 B &= -\frac{\partial}{\partial r_j} \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha i} v_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\
 &= -\frac{\partial}{\partial r_j} \sum_{\alpha} m_{\alpha} (v'_{\alpha i} + V_i)(v'_{\alpha j} + V_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}),
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

por otro lado del resultado obtenido en (3.41) podemos observar que los términos cruzados se anulan, puesto que $\sum_{\alpha} V_i v_{\alpha j} \phi = V_i \sum_{\alpha} v_{\alpha j} \phi = 0$, por lo tanto (3.42) queda

$$\begin{aligned}
 B &= -\frac{\partial}{\partial r_j} \left[\sum_{\alpha} m_{\alpha} V_i V_j \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \sum_{\alpha} m_{\alpha} v'_{\alpha i} v'_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \right] \\
 &= -\frac{\partial}{\partial r_j} \left[\rho V_i V_j + \sum_{\alpha} m_{\alpha} v'_{\alpha i} v'_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \right].
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

Teniendo A y B podemos tener la expresión completa para (3.34), y si la comparamos con la ecuación de conservación del momento

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r_j} (\rho V_i V_j - \sigma_{ij}) = A + B, \tag{3.44}$$

donde podemos identificar la expresión para el tensor de esfuerzo $\hat{\sigma}$ en dos contribuciones, una cinética $\hat{\sigma}^k$ y otra de contacto o colisional $\hat{\sigma}^c$ siendo

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^k + \sigma_{ij}^c, \tag{3.45}$$

$$\sigma_{ij}^k = -\sum_{\alpha} m_{\alpha} v'_{\alpha i} v'_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}), \tag{3.46}$$

$$\sigma_{ij}^c = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta i} r_{\alpha\beta j} \int_0^1 \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} + s \mathbf{r}_{\alpha\beta}) ds. \tag{3.47}$$

Un problema con (3.46) es que depende de la escala w de la función de grano grueso ϕ . Artoni y Richard publicaron un trabajo donde proponen

definir las fluctuaciones de velocidad (3.40) con respecto a la posición de la partícula α y no con respecto a la posición \mathbf{r} agregando el gradiente de un campo de velocidades promediado en el punto \mathbf{r} y en el tiempo t , donde cada componente es

$$\mathbf{v}'_{\alpha i}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\alpha, t) \equiv v_{\alpha i}(t) - \bar{V}_i(\mathbf{r}) + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha) \cdot \nabla \bar{V}_i. \quad (3.48)$$

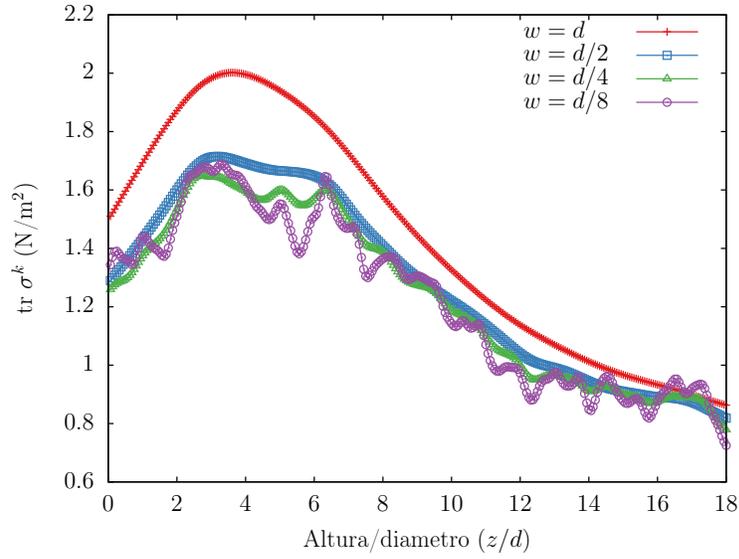
Aplicando esa corrección se obtiene una descomposición del tensor cinético en dos partes, una parte puramente cinética $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^\kappa$ independiente de w y un nuevo término $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^\gamma$ que contiene toda la dependencia del tamaño del dominio promediado w . Los términos derivados son los siguientes

$$\sigma_{ij}^k = \sigma_{ij}^\kappa + \sigma_{ij}^\gamma, \quad (3.49)$$

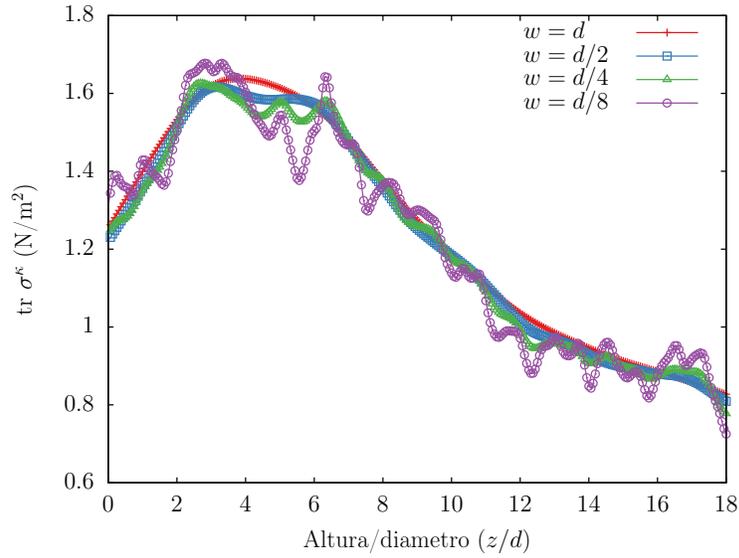
$$\sigma_{ij}^\kappa = - \sum_{\alpha} m_{\alpha} \mathbf{v}'_{\alpha i} \mathbf{v}'_{\alpha j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}), \quad (3.50)$$

$$\sigma_{ij}^\gamma = -\rho(\mathbf{D} \cdot \nabla V_i)(\mathbf{D} \cdot \nabla V_j), \quad (3.51)$$

donde $\rho D_i^2 = \sum_{\alpha} m_{\alpha} (r_{\alpha i} - r_i)^2 \phi$. Por lo tanto podemos usar (3.50) y (3.48) para obtener el tensor de esfuerzos cinético sin importar la resolución w . En la Figura 3.2 podemos observar la diferencia de usar esta corrección donde ya no hay dependencia de la resolución escogida w . Todas los detalles y derivaciones pueden ser encontrados en [45].



(a)



(b)

Figura 3.2: Resultados del perfil de la traza del tensor de esfuerzos con la altura de un silo en descarga de granos con diámetro d y utilizando una función de grano grueso Gaussiana con diferentes resoluciones w para (a) la definición (3.46) y (b) con la definición corregida (3.50).

Capítulo 4

Silo bidimensional

En este capítulo se expondrán los resultados obtenidos de las simulaciones de un silo bidimensional con granos polidispersos como discos con tres grados de libertad (dos traslacionales y uno rotacional). Se obtuvo el esfuerzo en la base para verificar el modelo de Janssen, la distribución de esfuerzos en las paredes y en el interior de la columna granular. Se observó el comportamiento del parámetro K de Janssen cuando se varía el coeficiente de fricción, la polidispersidad, el tamaño del silo y el tamaño de los granos. La base del silo fue movida lentamente hacia abajo con tres propósitos: 1) simular el experimento en [17], 2) usar el hecho de que la fuerza de fricción con las paredes es movilizada y desmovilizada de vez en vez, cambiando la historia del sistema y obteniendo una mejor estadística, y 3) que el granulado este cerca del punto de la falla de Coulomb, mejorando el contacto entre el modelo de Janssen y la simulación. Este trabajo ha sido publicado en la revista científica *Physical Review E* 97, 012903 (2018) [10].

4.1. Descripción de las simulaciones

En todas las simulaciones se utilizó una malla hexagonal con un poco más de un diámetro máximo de distancia entre los centros de los granos para evitar traslapes; los radios tuvieron una dispersión uniforme y aleatoria, es decir $R_\alpha = R_{\text{ave}} + a\Delta R$, donde R_{ave} es el radio promedio, ΔR es la fluctuación máxima, y a es un número aleatorio escogido entre -1 y 1 ; los granos tuvieron una densidad superficial $\rho = 4.0 \text{ g/cm}^2$, tiempo de colisión $t_{\text{col}} = 10^{-4} \text{ s}$, coeficiente de restitución normal $e_n = 0.5$, y se utilizó una relación de constantes de rigidez $\kappa_n = \kappa_s$ y disipación $5\gamma_n = \gamma_s$ para el modelo de fuerzas de contacto; la velocidad inicial de cada grano fue $v_0 = 1.0 \text{ cm/s}$

en dirección aleatoria, y sin velocidad angular inicial; el silo fue rectangular con ancho ajustable, altura indefinida, paredes rígidas obedeciendo las mismas reglas de interacción como los discos del sistema; el coeficiente de fricción estático y dinámico fue el mismo; el paso en el tiempo se configuró en $dt = t_{\text{col}}/150$.

Los granos caen por gravedad primero hacia una base estática, después de $\sim 10^6$ pasos en el tiempo la energía cinética total del sistema cae a $\sim 10^{-19}$ J, lo cual comparado con la escala de energía $\sim 10^{-4}$ J (un grano cayendo por gravedad una distancia de un diámetro) puede ser considerada cero; para obtener estos valores fue necesario usar variables en doble precisión. Después de ese tiempo la base fue lentamente movida hacia abajo con una velocidad $v_b = 0.001\sqrt{4gR_{\text{ave}}}$ donde g es la aceleración de la gravedad.

En la primera serie de simulaciones se consideró un silo de ancho $L = 20$ cm, granos con $R_{\text{ave}} = 0.5$ cm y $\Delta R = 0.10$ cm. Los coeficientes de fricción grano-grano y grano-pared fueron iguales, $\mu_w = \mu$, y se probó usando $\mu = 0.2, 0.4, 0.6$ y 0.8 . Las simulaciones fueron corridas con diferente número de granos, alcanzando hasta 4000 en pasos de 200 granos. Se utilizaron 9×10^6 pasos en el tiempo.

En la segunda serie de simulaciones se utilizaron el mismo ancho del silo, radio promedio de grano, pero se fijó $\mu = 0.6$ variando la dispersión de radios $\Delta R = 0.10, 0.20, 0.25$ y 0.30 cm. El número de granos y el paso de tiempo fue el mismo que en la anterior serie.

La siguiente serie de simulaciones fue realizada con un ancho de silo $L = 40, 60$ y 80 cm, coeficiente de fricción $\mu = 0.6$, $\Delta R = 0.10$ cm y el mismo radio promedio que las anteriores. Para las simulaciones con $L = 40$ cm el número máximo de granos alcanzado fue de 16000 en pasos de 800 con 12×10^6 pasos en el tiempo. Para $L = 60$ cm el número máximo de granos fue de 36000 en pasos de 1800 con 15×10^6 pasos en el tiempo. Para $L = 80$ cm el número máximo fue de 64000 en pasos de 3200 con 18×10^6 pasos en el tiempo.

Finalmente una serie de simulaciones fue llevada a cabo con $\mu = 0.6$ y $L = 20$ cm. Se varió $R_{\text{ave}} = 0.5, 0.25, 0.167$ y 0.125 cm para un número máximo de granos igual a 4000, 16000, 36000 y 64000 granos respectivamente. La dispersidad de radios se mantuvo en $\pm 20\%$ y los pasos en el tiempo igual que en la serie anterior. La masa total es fija, solo cambian las dimensiones de los granos.

Todas las simulaciones tuvieron 16 repeticiones cambiando los números aleatorios para la distribución de radios y la orientación de las velocidades iniciales. Los códigos fueron escritos en CUDA-C para acelerarlos con paralelización por GPU en tarjetas NVIDIA Tesla K20 y K40. Las simulaciones

fueron observadas con la herramienta de visualización OVITO [46, 47], donde podemos observar las cadenas de fuerza. En la Figura 4.1 se presentan ejemplos de dos silos con las cadenas de fuerza evidenciándose.

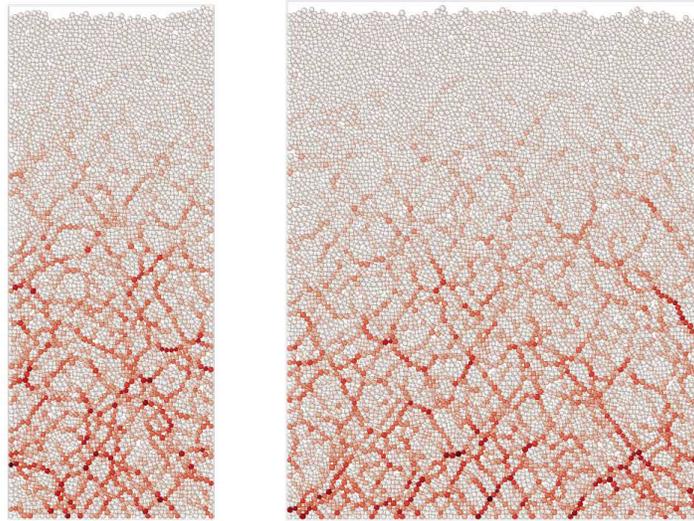


Figura 4.1: Cadenas de fuerza en silos con 4000 granos (izquierda) y 8000 granos (derecha) usando $\mu = 0.6$.

De cada simulación obtuvimos la fuerza normal y tangencial sobre las paredes, la fuerza normal sobre la base, la distribución en tiempo y en altura de las fuerzas sobre las paredes, y la matriz de esfuerzos interno de la columna granular. En la Figura 4.2 graficamos las fuerzas tangenciales en las paredes y la fuerza normal en el fondo, iniciando cuando la base empieza a moverse. La fuerza tangencial total en las paredes ya excede la fuerza normal en el fondo para una simulación de 1600 granos. Esto indica que la mayor parte del peso de la columna granular es cargada por las paredes. Las fuerzas se encuentran en fase y se puede notar picos bien definidos de vez en vez. El movimiento hacia abajo de la base induce avalanchas internas, y por lo tanto la columna granular esta sujeta a un ciclo de compresión y descompresión. Igualmente podemos notar que el peso en el fondo alcanza la saturación incluso con una base movable y es más pequeño que la saturación de peso para una base estática (al inicio de la simulación); esto confirma el resultado experimental obtenido en [17], sin embargo la resolución alcanzada en ese trabajo no parece ser suficiente para mostrar avalanchas internas.

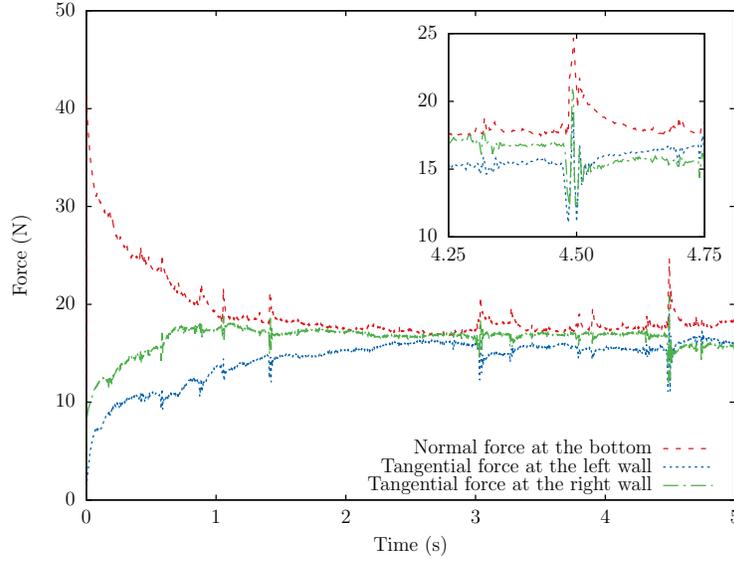


Figura 4.2: Fuerzas en las paredes laterales y en la base del silo como una función del tiempo, iniciando en el momento que la base empieza a desplazarse hacia abajo. Este es un comportamiento típico de fuerzas para 1600 granos y $L = 20$ cm. La gráfica interior muestra una ampliación de un pico debido a avalanchas internas. Se puede observar la sincronización del pico para la fuerza normal en la base y tangencial en las paredes pero con signos contrarios. Se puede notar que las fuerzas tangenciales en la pared derecha e izquierda están cerca pero son diferentes y que las avalanchas afectan ambos lados del silo simultáneamente.

Después de un tiempo transiente, el esfuerzo normal en la base del silo fue promediado. Se obtuvieron 20 puntos de diferentes alturas de columna granular para luego ajustar el modelo de Janssen con el parámetro libre K y un parámetro de proporcionalidad α , tal que el esfuerzo vertical $\sigma_{zz} = \alpha \sigma_{zz}^{\text{Jan}}$, con $\alpha = 1$ tenemos el modelo de Janssen original que para dos dimensiones es

$$\sigma_{zz}^{\text{Jan}} = \frac{\rho_b g L}{2\mu_w K} \left(1 - e^{-2\mu_w K z / L} \right); \quad (4.1)$$

la densidad de bulto ρ_b fue calculada con la masa total de los granos y el área final de la columna granular, obteniendo un valor de 3.23 ± 0.02 g/cm². Para valores bajos de coeficiente de fricción, valores altos de dispersidad de radios o bases grandes, obtuvimos valores ligeramente más altos de densidad de bulto. Todos los datos de ajuste de todas las simulaciones realizadas se pueden observar en el Cuadro 4.1.

Cuadro 4.1: Parámetros de ajuste al modelo de Janssen.

| Parámetro de simulacion | K | α |
|-----------------------------------|-----------------|-----------------|
| $L = 20$ cm; $\Delta R = 0.1$ cm | | |
| $\mu = 0.10$ | 0.92 ± 0.01 | 1.00 ± 0.01 |
| 0.15 | 0.87 ± 0.01 | 0.99 ± 0.01 |
| 0.20 | 0.86 ± 0.01 | 1.00 ± 0.01 |
| 0.40 | 0.66 ± 0.01 | 0.95 ± 0.02 |
| 0.60 | 0.46 ± 0.01 | 0.91 ± 0.02 |
| 0.80 | 0.39 ± 0.01 | 0.94 ± 0.03 |
| $L = 20$ cm; $\mu = 0.6$ | | |
| $\Delta R = 0.10$ cm | 0.46 ± 0.01 | 0.91 ± 0.02 |
| 0.20 cm | 0.55 ± 0.02 | 0.99 ± 0.03 |
| 0.25 cm | 0.53 ± 0.02 | 0.95 ± 0.03 |
| 0.30 cm | 0.49 ± 0.03 | 0.88 ± 0.05 |
| $\Delta R = 0.10$ cm; $\mu = 0.6$ | | |
| $L = 20$ cm | 0.46 ± 0.01 | 0.91 ± 0.02 |
| 40 cm | 0.36 ± 0.01 | 0.87 ± 0.02 |
| 60 cm | 0.24 ± 0.01 | 0.80 ± 0.02 |
| 80 cm | 0.16 ± 0.01 | 0.72 ± 0.02 |
| $L = 20$ cm; $\mu = 0.6$ | | |
| $R = 0.500 \pm 0.100$ cm | 0.46 ± 0.01 | 0.91 ± 0.02 |
| 0.250 \pm 0.050 cm | 0.35 ± 0.02 | 0.84 ± 0.03 |
| 0.167 \pm 0.033 cm | 0.19 ± 0.01 | 0.71 ± 0.03 |
| 0.125 \pm 0.025 cm | 0.17 ± 0.01 | 0.72 ± 0.02 |

4.2. Variando el coeficiente de fricción

En la Figura 4.3 mostramos el esfuerzo vertical σ_{zz} para diferentes coeficientes de fricción, donde se puede ver claramente el perfil de Janssen. Debido al hecho de que las paredes cargan parte del peso por las fuerzas de fricción, los sistemas con baja fricción alcanzan un esfuerzo de saturación más grande que sistemas con grandes coeficientes de fricción. También podemos observar la relación inversa entre la saturación de esfuerzo vertical y el coeficiente de fricción, aunque para valores de fricción más grandes que 0.5 los valores de saturación no decrecen significativamente.

El Cuadro 4.1 muestra los parámetros de ajuste al modelo de Janssen. El parámetro α esta cerca de 1, lo cual indica que las predicciones de Janssen para el esfuerzo vertical son aceptables incluso para silos con una base movable lentamente. El parámetro K , el cual representa la deflexión del del esfuerzo vertical a horizontal, varía y llega a ser más pequeño con grandes coeficientes de fricción. Estos resultados están de acuerdo con el límite esperado de K ; el sistema con $\mu = 0$ tiene un comportamiento similar a un líquido donde la presión horizontal y vertical es la misma (principio de Pascal).

4.3. Variando la dispersidad de radios

El esfuerzo vertical σ_{zz} en el fondo para diferente dispersidad de radios es graficado en la Figura 4.4. Este cambio no tiene efectos notables en el perfil de σ_{zz} , y el modelo de Janssen se ajusta bien a los datos de simulación. Esto sugiere que el modelo de Janssen es independiente al grado de polidispersidad del sistema. Ha sido reportado que la longitud de las cadenas de fuerza parecen ser independientes de la polidispersidad en [48]. Es claro que dispersidades pequeñas pueden presentar cristalización, lo cual podría ser el origen a diferentes resultados. Con el fin de saber el grado de cristalización, obtuvimos el parámetro escalar de orden para una simetría hexagonal $\psi_6 = |\langle e^{i6\theta_c} \rangle_c|$, donde el promedio es tomado sobre todas las direcciones de contacto θ_6 en las vecindades de un grano de referencia; los valores de ψ_6 van de 0.2 para sistemas pequeños a 0.01 para sistemas más grandes, implicando una falta de cristalinidad en la columna granular. El movimiento de la base hacia abajo tiende a destruir el orden en el silo.

En el Cuadro 4.1 se encuentran los parámetros de ajuste al modelo de Janssen. Los sistemas con gran dispersidad de radios tiene una K ligeramente más grande. Si consideramos el ligero incremento de la densidad de bulto para grandes valores de ΔR , entonces estos resultados están en desacuerdo

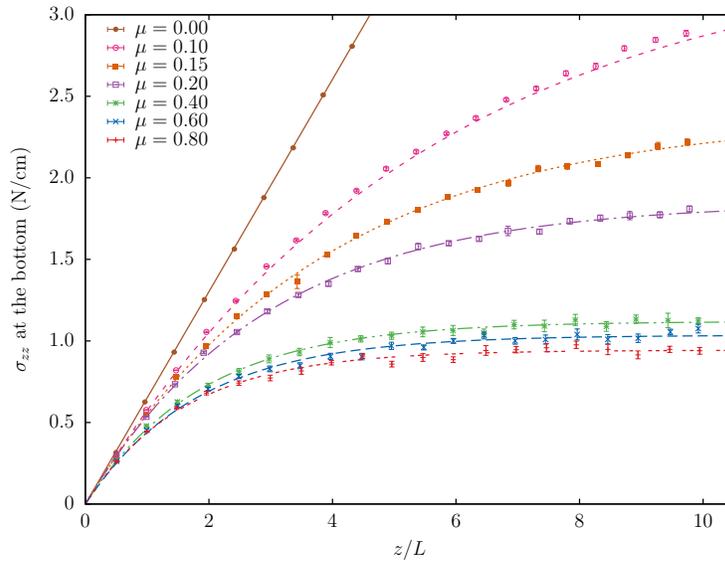


Figura 4.3: Esfuerzo vertical σ_{zz} para un silo de ancho $L = 20$ cm con diferentes valores de coeficiente de fricción μ . Los puntos son promedios sobre 16 simulaciones. Las líneas son el mejor ajuste al modelo de Janssen. Un comportamiento totalmente hidrostático se puede notar cuando no hay fricción ($\mu = 0$). En el Cuadro 4.1 podemos observar que α es más pequeña que uno para grandes valores de μ .

con [22, 24], aunque los cambios en la densidad de bulto son muy pequeños para implicar un diferencia importante.

4.4. Variando el ancho del silo

En la Figura 4.5 mostramos σ_{zz}/L como una función de la relación de aspecto z/L de la columna granular para silos con diferente ancho. Cuando la cantidad incrementa, el modelo de Janssen empieza a perder relevancia y la propagación de fuerza es disminuida en la dirección horizontal. Aunque la relación de aspecto altura-ancho es mantenida igual para todos los sistemas, los silos con bases más grandes no alcanzan la saturación de esfuerzo vertical. Cuando el ancho aumenta, la presión en el fondo tiende a un comportamiento hidrostático. Esto indica que para sistemas grandes la fricción en las paredes juega un rol menor para la determinación de la presión en el fondo. Esto puede deberse a que las cadenas de esfuerzo tienen cierta longitud de granos y forman cierto ángulo con la horizontal, el incrementar el ancho del silo

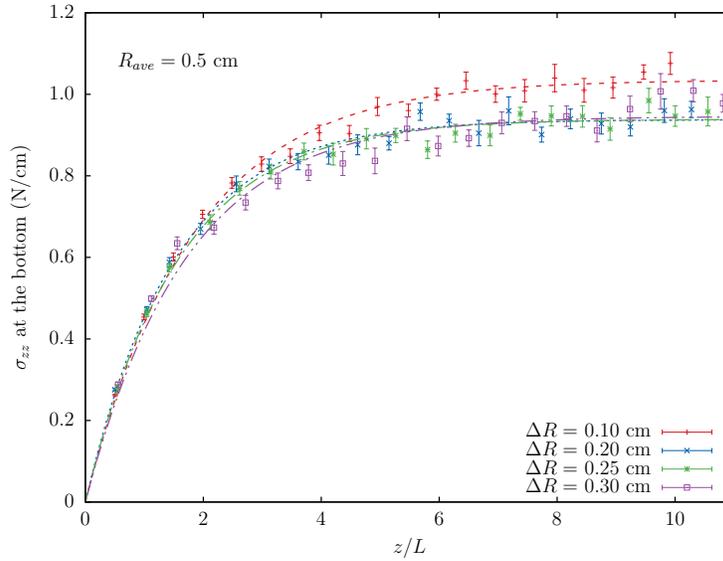


Figura 4.4: Esfuerzo vertical σ_{zz} para un silo de ancho $L = 20$ cm con $\mu = 0.6$ y diferentes valores de dispersidad de radios. Los puntos son promedios sobre 16 simulaciones. Las líneas son el mejor ajuste al modelo de Janssen. Las columnas granulares con gran dispersidad son un poco más altas que para baja dispersidad, aunque su densidad de bulto son similares. Para la dispersidad más pequeña ($\Delta R = 0.10$ cm) tenemos un peso de saturación un poco más elevado; los ajustes para los demás sistemas son muy similares.

no incrementa necesariamente la longitud de estas cadenas de esfuerzo o su orientación, por lo que el material granular ubicado en el centro de la columna no llega a ser soportado por la fricción de los granos en estas cadenas de esfuerzo con las paredes. Muchas de las cadenas formadas en el centro de la columna granular terminan llegando a la base del silo, así que mientras se aumenta el ancho de la columna un porcentaje cada vez mayor del peso es cargado por la base acercándose al comportamiento puramente hidrostático, incluso manteniendo la misma relación de aspecto z/L .

El Cuadro 4.1 muestra los parámetros de ajuste para silos de diferente ancho. Cuando el tamaño de la base aumenta, el parámetro K disminuye rápidamente, lo cual sugiere que las cadenas de esfuerzo no son lo suficientemente largas para alcanzar las paredes y formar arcos estables. El parámetro α , así como K , disminuye cuando el tamaño de la base aumenta. Ya que α no está incluida en el modelo original, su alejamiento al valor de 1 puede

pensarse como una falla del modelo. Por otro lado, un decremento en K y el comportamiento general observado en la Figura 4.5 están dentro de los límites del modelo. Sin embargo, los resultados indican que para bases grandes llega a ser difícil para el modelo ajustarse a los datos.

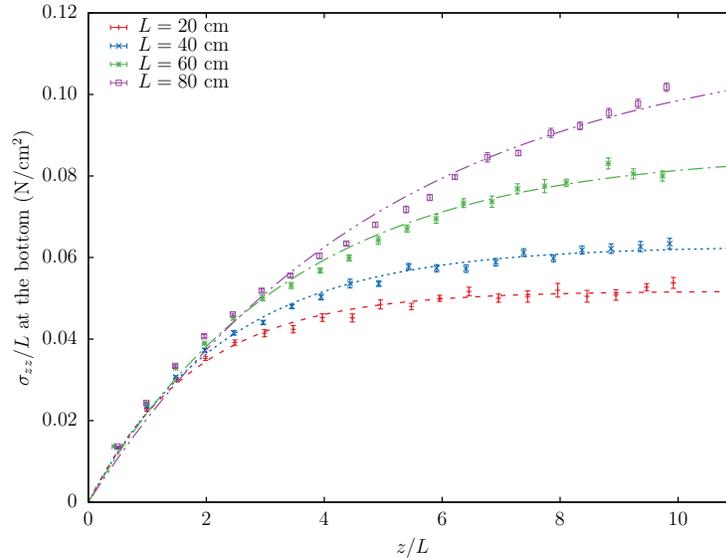


Figura 4.5: Gráfica para σ_{zz}/L como función de la relación de aspecto z/L de la columna, donde σ_{zz} es el esfuerzo vertical sobre el fondo para silos con $\mu = 0.6$ y diferente anchos. Los puntos son promedios sobre 16 simulaciones. Las líneas son el mejor ajuste del modelo de Janssen. El esfuerzo vertical en el fondo no alcanza la saturación para valores grandes de L , incluso para columnas con relación de aspecto tan grandes como 10. En general, el comportamiento llega a ser más hidrostático como L crece.

Con el objetivo de observar el comportamiento de la presión en el fondo cuando el ancho del silo incrementa, en la Figura 4.6 mostramos simulaciones con la misma razón W/L , donde W es el peso del material granulado. En principio, la presión en el fondo tiende a un comportamiento hidrostático con grandes bases ya que los bordes pierden relevancia. Para grandes bases, la fricción entre las paredes y los granos es relevante solo para columnas estrechas.

La distribución de esfuerzos en las paredes fue obtenido promediando varios histogramas generados por cada paso en el tiempo. En la Figura 4.8 mostramos la distribución de esfuerzos normal y tangencial para silos de

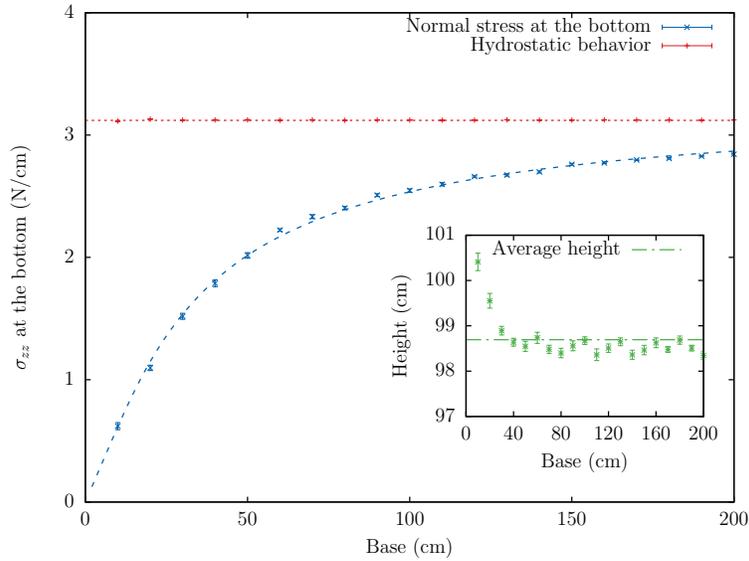


Figura 4.6: Esfuerzo normal σ_{zz} en el fondo para silos con diferente bases pero la misma relación de aspecto W/L (W : peso de la columna, L : ancho del silo). La gráfica en el interior muestra el comportamiento de la altura de la columna para el silo con base creciente: para grandes bases, algunos reordenamientos de los granos reducen ligeramente la altura. La línea sólida es el ajuste de Janssen con $\alpha = 1$, $K = 0.45 \pm 0.01$ y usando una altura promedio de 98.7 cm.

diferente anchos. Para el protocolo seguido aquí, el máximo esfuerzo normal se da alrededor de $2/3$ de la altura de la columna granular, medida desde arriba, como puede observarse para el sistema con un gran número de granos ($L = 80$). Podemos ver que cerca de la superficie del silo el esfuerzo tangencial cambia de dirección (zona negativa); esto está asociado a nuestro protocolo de una base moviéndose hacia abajo. El esfuerzo tangencial es más grande cerca de la base, como se esperaba del hecho de que la mayoría del peso de la columna granular es cargado por la mitad inferior de las paredes del silo. Si observamos la Figura 4.8, podemos notar que el modelo de Janssen no aplica para la parte superior del silo: en esa zona, el esfuerzo normal en las paredes tiene un comportamiento hidrostático y el tangencial es irrelevante. Para silos muy grandes el parámetro K tiende a cero, lo que indicaría que la deflexión del esfuerzo vertical hacia la horizontal es cada vez menor, sin embargo, en las paredes se encuentran esfuerzos normales significativos tendiendo al caso hidrostático donde la presión a cierta profundidad es la misma en la vertical

como en la horizontal. Igualmente podemos observar que en la mitad inferior la distribución del esfuerzo tangencial tiende a ser homogénea mientras que la normal disminuye. Todo esto sugiere que no se puede definir una K general para toda la columna granular y podría cambiar con la profundidad, esto es, $K = K(z)$, al menos para grandes sistemas.

Para estudiar el comportamiento del esfuerzo en el interior de la columna granular, obtuvimos el tensor de esfuerzos. Como la velocidad de las partículas es muy pequeña no consideramos el esfuerzo cinético descrito en el método de grano grueso, solo obtuvimos el esfuerzo de contacto. La función de grano grueso utilizada en la definición dada en la formula (3.47) fue una Heaviside (función escalón), de esta forma nos evitamos la integral. El tensor de esfuerzo queda definido por lo tanto como

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^c = \frac{1}{A} \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta i} r_{\alpha\beta j}, \quad (4.2)$$

donde la suma es llevada a cabo sobre todos los contactos entre partículas contenidos dentro de una celda previamente definida de área A (suficientemente grande para ajustar 20 celdas a lo largo del ancho del silo), $F_{\alpha\beta i}$ es el componente i -ésimo de la fuerza de interacción entre dos granos α - β en el punto de contacto, y $r_{\alpha\beta j} = r_{\alpha j} - r_{\beta j}$ el componente j -ésimo del vector que conecta sus centros.

En la Figura 4.9 se muestra la distribución de esfuerzo normal (presión hidrostática) obtenida usando la cantidad $(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})/2$, y la distribución de esfuerzos tangenciales internos usando $(\sigma_{xz} + \sigma_{zx})/2$. Las gráficas están normalizadas con los valores máximos encontrados en cada caso, los cuales son, de izquierda a derecha, 3.8, 6.9, 11.0, y 15.0 N/cm respectivamente para la Figura 4.9(a), y 1.8, 2.0, 2.4, y 2.9 N/cm, respectivamente para la Figura 4.9(b). Para sistemas con gran número de granos, la máxima presión es aproximadamente en medio del silo en la dirección horizontal, y un poco debajo de la mitad en la dirección z . El esfuerzo tangencial en las paredes es máximo en la mitad inferior del silo como se muestra en la Figura 4.8(b). En general, cerca del fondo el esfuerzo tangencial es positivo en el lado izquierdo y negativo en el derecho, pero en la parte superior hay una ligera inversión de signos.

Es conveniente observar la distribución de esfuerzo a lo largo del ancho de los silos para diferentes regiones de la columna granular. Dividimos la columna en quintiles, cada uno cubriendo un área de 20 celdas a lo ancho y aproximadamente 40 celdas de alto; un promedio fue hecho para cada columna en el quintil. La Figura 4.10 muestra la distribución de esfuerzos a

lo largo de la dirección horizontal para cuatro silos con $z/L = 10$. El primer quintil corresponde al fondo y el quinto a la parte superior; en silos con gran ancho la diferencia es marcada. Para grandes anchos, el esfuerzo normal es más grande en medio de la base y se concentra en el segundo y tercer quintiles. El silo con base más pequeña tiene una distribución homogénea en la dirección horizontal. El esfuerzo tangencial es más grande a medida que nos acercamos a las paredes y se concentra en el primer y segundo quintiles. En el resto de la columna, la distribución es ligeramente homogénea. Esto sugiere que parte del peso de la columna granular es cargado solo por la parte inferior de las paredes donde la fricción juega un rol importante. En la parte superior de las paredes el comportamiento del esfuerzo parece ser hidrostático, sin embargo, observamos una ligera inversión de signos con respecto al encontrado en la parte baja de las paredes.

En la Figura 4.11 se muestra la distribución de fuerzas ejercidas en las paredes. La distribución de fuerzas parece ser independiente del coeficiente de fricción, dispersidad de los radio, y la base del silo. Podemos notar el amplio rango de la amplitud de fuerzas alcanza hasta 15 veces la fuerza promedio. La frecuencia para grandes fuerzas decae exponencialmente, pero para fuerzas pequeñas tiene un ligero incremento. Estos resultados están de acuerdo con los experimentos llevados a cabo en [49] donde la distribución es aproximadamente uniforme para fuerzas debajo del promedio, decae exponencialmente para fuerzas más grandes que el promedio, y aumenta ligeramente para fuerzas cercanas a cero. Aunque se han propuesto diversos modelos [50] aún no se ha podido obtener uno que prediga la distribución de fuerzas con exactitud.

4.5. Variando el radio promedio

El incremento en hidrostaticidad del sistema como la base del silo incrementa (aún manteniendo la relación de aspecto z/L) sugiere que un medio hecho con partículas pequeñas (pequeñas con respecto al tamaño del silo) debería empezar de apartarse de un puro comportamiento tipo Janssen. La pregunta fundamental aquí es la que sigue: ¿un medio de partículas muy pequeñas llega a ser hidrostático, incluso si aún hay fuerzas de fricción? Nótese que la presencia de las constantes g y el tiempo de colisión t_{col} significa que no es trivial escalar de dimensiones el sistema, y por lo tanto no se puede usar los resultados mostrados para predecir en una forma fácil el comportamiento de silos con el mismo tamaño pero partículas más pequeñas. De acuerdo a esto, simulamos silos con diferente radio de grano promedio de una forma similar a las simulaciones con silos de diferente bases, manteniendo la masa

total del granulado constante. La Figura 4.7 muestra σ_{zz} en el fondo del silo para diferentes radios promedio, con 20% de dispersidad de radios. Si comparamos con la Figura 4.5, podemos notar la pérdida de relevancia del modelo de Janssen cuando $R_{ave}/L < 0.008$.

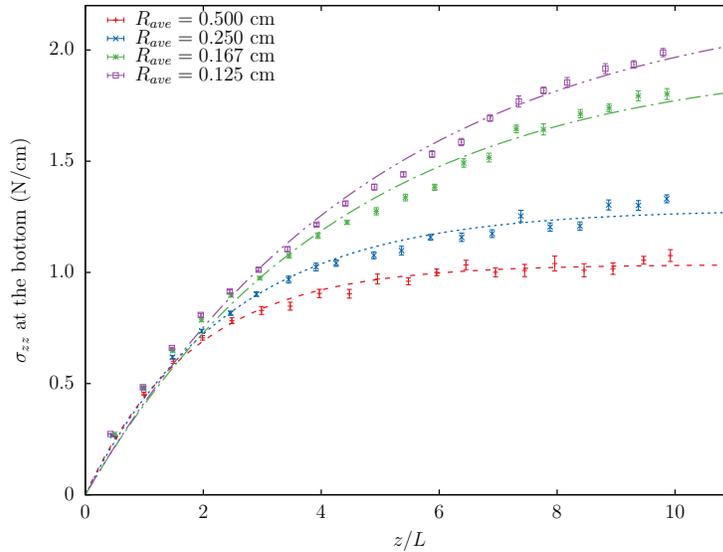
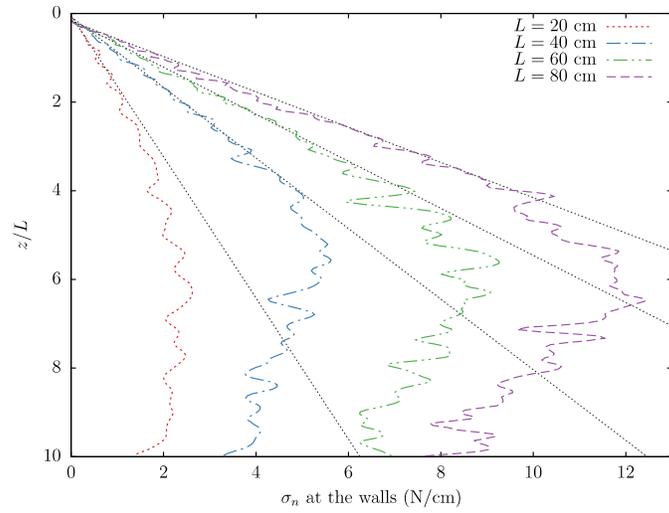


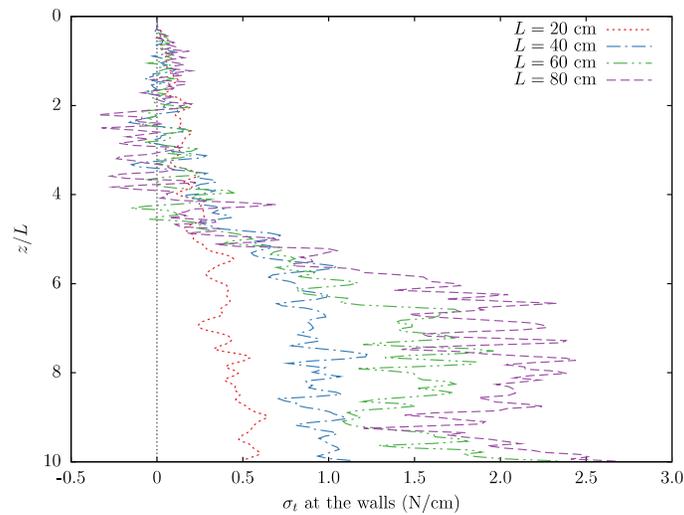
Figura 4.7: Esfuerzo vertical σ_{zz} sobre el fondo para un silo con ancho $L = 20$ cm, con $\mu = 0.6$, y diferente valores de radio promedio. Los puntos son promedios sobre 16 copias. Las líneas son el mejor ajuste del modelo de Janssen. Podemos observar la similitud con la Figura 4.5.

De acuerdo al Cuadro 4.1, notamos que los valores de K y α son similares a los silos con bases diferentes, sugiriendo de esa manera que el mismo R_{ave}/L da el mismo comportamiento para la presión en el fondo. Sin embargo, encontramos un comportamiento diferente en las paredes. La Figura 4.12 muestra la distribución de esfuerzo sobre las paredes para silos con granos de distinto radio promedio. El esfuerzo normal sobre las paredes decae cuando el radio promedio disminuye; esto puede ser atribuido a fuertes cadenas de esfuerzo a lo largo de la dirección vertical, la cual hace que la parte central del silo se comporte como un material sólido con poca deflexión horizontal; igualmente se puede notar que K disminuye cuando el radio promedio disminuye, que va de acuerdo con la observación de arriba. El esfuerzo tangencial sobre las paredes para silos con partículas de radio promedio pequeño tienen casi el mismo comportamiento, indicando que la parte del peso del

material cargado por las paredes satura para $R_{ave}/L < 0.008$, y como se vio anteriormente, esta concentrado en la mitad inferior de la altura del silo.



(a)



(b)

Figura 4.8: Distribución de esfuerzos (a) normal y (b) tangencial sobre las paredes, para diferentes anchos de silo y manteniendo la relación de aspecto fija. Los datos fueron suavizados con Gnuplot, usando la opción “acsplines”, donde el error estándar fue usado como peso de suavizado. En (a), para los sistemas grandes ($L = 60$ y 80 cm) notamos un comportamiento cuasi-lineal en la primera mitad del silo, similar a la presión hidrostática (líneas negras obtenidas usando $\sigma_n = \rho_b g z$), confirmando [14]. Nótese en (b) la presencia de esfuerzos tangenciales negativos cerca de la parte superior de la columna; esos esfuerzos están relacionados al hecho de que el fondo se desliza para abajo, así que las paredes “jalan” a los granos. Cerca del fondo, el peso de la columna cancela este efecto. En general, el esfuerzo tangencial en la parte superior del silo es cercano a cero, confirmando la observación de hidrostaticidad.

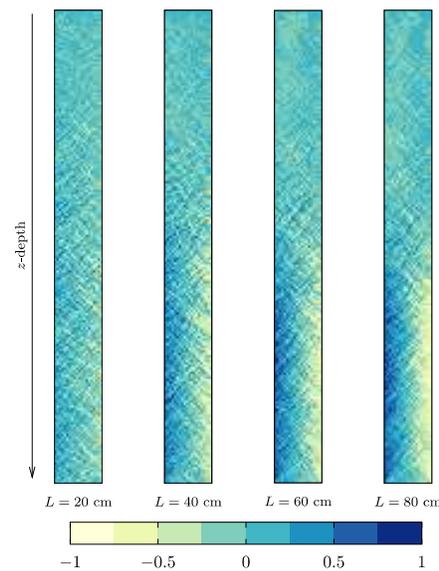
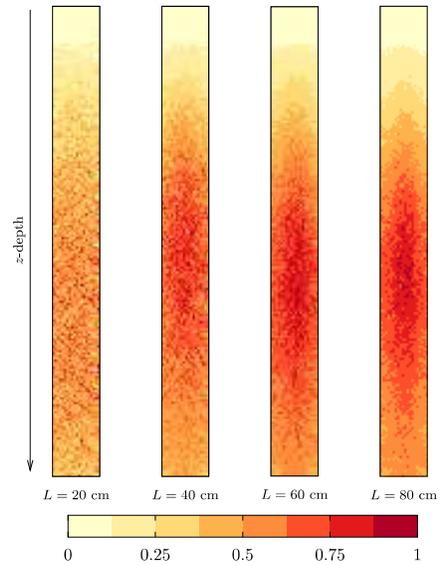


Figura 4.9: Distribución de esfuerzos interno (a) normal y (b) tangencial para silos con 4000, 16000, 36000, y 64000 granos manteniendo la relación de aspecto fijo. Las gráficas son promedios tomados sobre 16 copias y normalizados con el valor máximo encontrado en cada caso. Nótese que para grandes silos con relación de aspecto fijo, el máximo esfuerzo normal aparece en el centro en la dirección horizontal, y alrededor de $2/3z$. Los valores más grandes de esfuerzo tangencial tienden a aparecer en cadenas, pero pequeñas y generalmente lineales, formando ángulos agudos con las paredes, similar a un patrón de huesos de pescado.

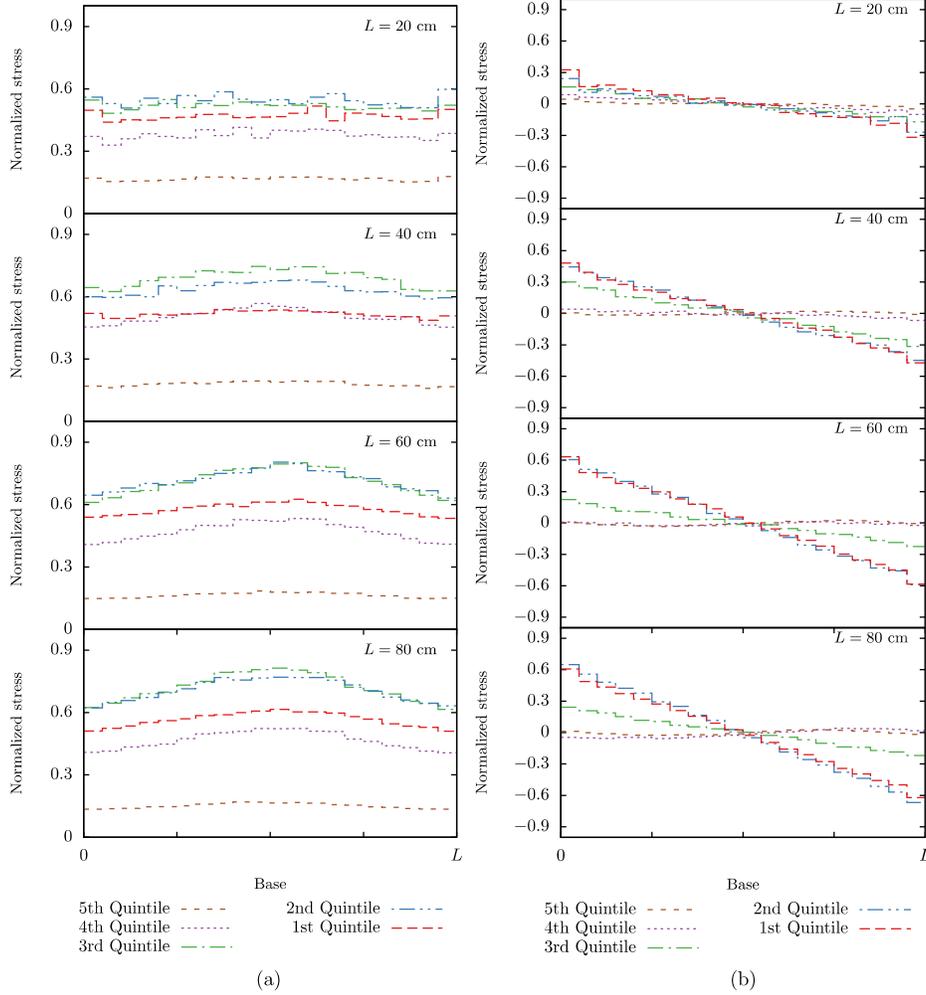
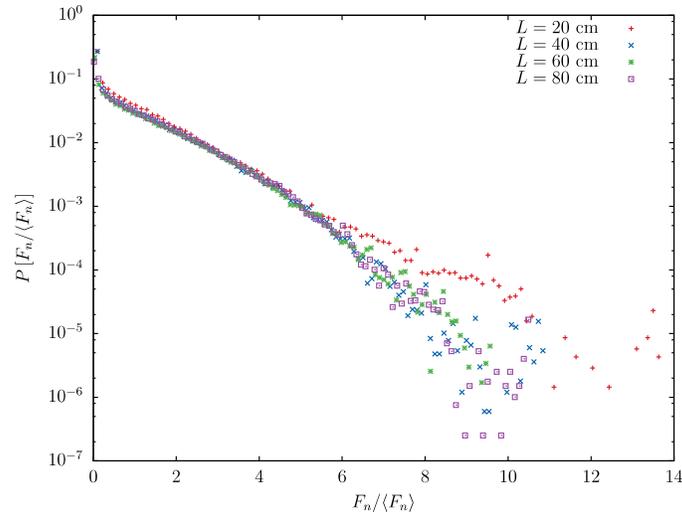
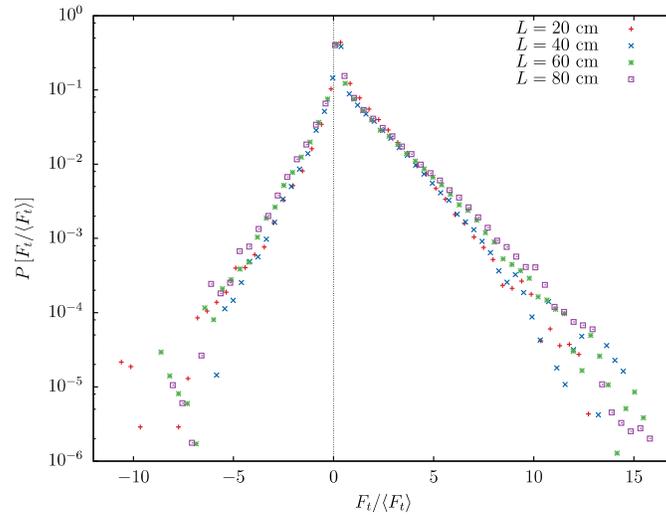


Figura 4.10: Histogramas de la distribución de esfuerzos interna (a) normal y (b) tangencial a lo largo de la dirección horizontal para cuatro silos con $z/L = 10$. El primer quintil corresponde al fondo y el quinto quintil a la parte superior de la columna. Se puede notar como el esfuerzo normal se concentra en el centro conforme L crece, en particular para granos en el segundo y tercer quintiles. Para grandes L el sistema muestra una inversión en la dirección del esfuerzo tangencial ya que en los dos quintiles más bajos esta cantidad va de positivo a negativo yendo de izquierda a derecha, pero para los quintiles superiores una pequeña variación puede encontrarse en la dirección opuesta.

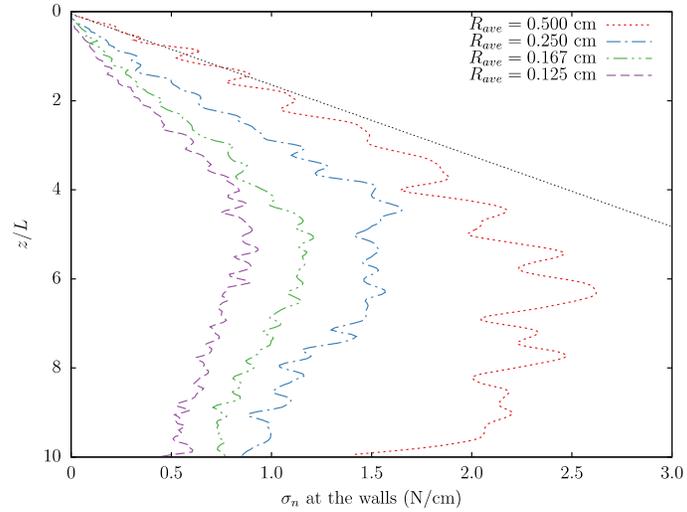


(a)

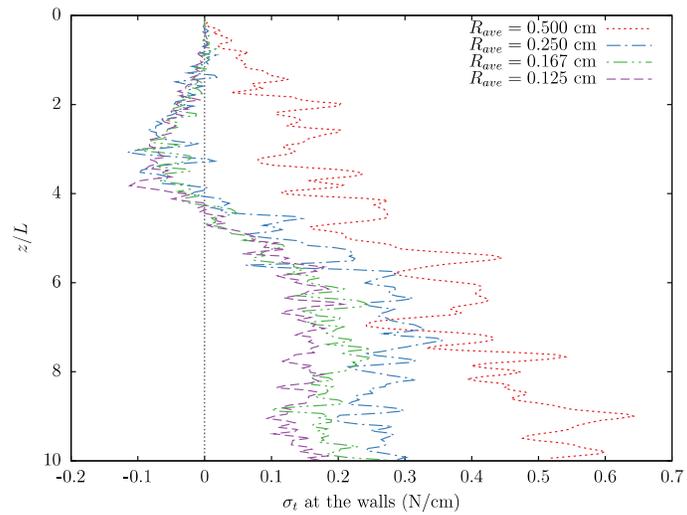


(b)

Figura 4.11: Distribución de probabilidad de fuerza (a) normal y (b) tangencial ejercida en las paredes para todo el tiempo de simulación con la base moviéndose. Podemos observar el decaimiento exponencial en la frecuencia cuando F_n crece, sin importar el número de granos. Para fuerzas normales muy cercanas a cero ($F_n / \langle F_n \rangle < 1$), la distribución muestra un comportamiento en ley de potencias. Las fuerzas tangenciales tienen una zona negativa debido al movimiento de la base, pero el rango es menor que la zona positiva. El comportamiento es similar a la distribución de fuerzas normales, mostrando una exponencial decayente para grandes valores de $|F_t|$, y un comportamiento en ley de potencias para $|F_t / \langle F_t \rangle| < 1$.



(a)



(b)

Figura 4.12: Distribución de esfuerzo (a) normal y (b) tangencial sobre las paredes, para diferente radio promedio pero manteniendo la masa. Los datos fueron suavizados con Gnuplot usando la opción “acsplines”, donde el error estándar fue usado como peso de suavizado. La línea negra es el comportamiento hidrostático de la presión. Cuando R_{ave} decrece, el esfuerzo normal en las paredes decrece.

Capítulo 5

Tolva cuasi-bidimensional

Este capítulo expondrá los resultados obtenidos de simulaciones de una tolva cuasi-bidimensional, es decir, una monocapa de esferas monodispersas libres de moverse en tres dimensiones en un contenedor con apertura con un espesor pequeño (poco más grande que un diámetro de grano) comparado con las dimensiones de su ancho y alto.

Se realizaron diferentes simulaciones variando el ángulo de la tolva y el ancho del orificio de descarga. Se obtuvo el flujo granular, el perfil de velocidades y la fracción de ocupación en el orificio; se analizaron los esfuerzos cinéticos y de contacto con el método de grano grueso cerca de la zona de descarga. Algunas simulaciones fueron comparadas con los datos experimentales facilitados por el Laboratorio de Medios Granulares de la Universidad de Navarra para validar los códigos utilizados. Este trabajo aún no ha sido publicado al momento de la realización de este escrito.

5.1. Descripción de las simulaciones

Se configuró un silo con tolva como el mostrado en la Figura 5.1. El ángulo β de la tolva fue variado desde 0° hasta 80° en pasos de 10° ; y el ancho $D = 2R$ del orificio de descarga fue variado desde 8 cm hasta 40 cm en pasos de 4 cm (excepto en la validación; donde los valores son los mismos que los utilizados en el experimento). El ancho del silo fue configurado a $10 + D$ cm, una altura suficiente para contener todos los granos, y un espesor $\varepsilon = 0.11$ cm. Para estar de acuerdo con los datos experimentales obtenidos con esferas de acero, simulamos 120000 granos como esferas monodispersas de radio $d = 0.1$ cm, densidad $\rho = 7.52$ g/cm³, coeficiente de restitución $e_n = 0.92$, coeficiente de fricción $\mu = 0.5$ entre ellas y con las paredes laterales (es

el mismo coeficiente tanto para la fricción estática como para la dinámica), tiempo de colisión $t_{\text{col}} = 10^{-4}$ s, y una relación de constantes de rigidez $2\kappa_n = 7\kappa_s$ y disipación $\gamma_n = 3\gamma_s$ para el modelo de fuerzas de contacto; el paso en el tiempo se configuró en $dt = t_{\text{col}}/100$.

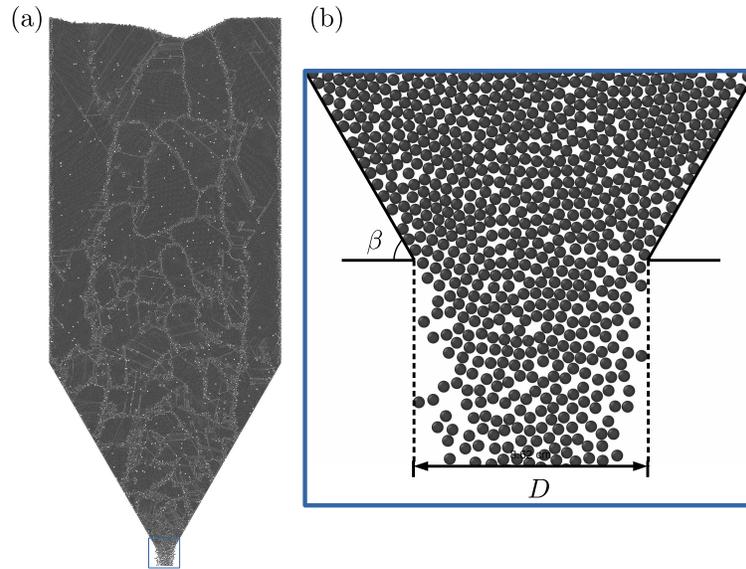


Figura 5.1: (a) Silo con tolva en descarga de una simulación con $\beta = 60^\circ$ y $D = 2$ cm. Al ser esferas monodispersas hay cristalización, por lo que en la figura se alcanza a distinguir las fronteras entre dominios cristalinos. (b) Ampliación alrededor del orificio de descarga.

Las esferas fueron colocadas inicialmente en un arreglo hexagonal con un poco más de un diámetro máximo de distancia entre los centros de los granos para evitar traslapes. La velocidad inicial fue configurada con magnitud de 10 cm/s en direcciones uniformemente aleatorias para todos los granos; la velocidad angular inicial fue de cero. Los granos caen por gravedad e interaccionan con las paredes rígidas laterales y los planos posteriores y frontales con las mismas reglas que entre granos. Después de cruzar el orificio recorren 2 cm para luego dejar de moverse e interaccionar con el resto del sistema, es decir, desaparecen y la columna granular va disminuyendo con el tiempo. Después de 1.5 s de tiempo transiente se tomó 1 s de datos para el análisis de esfuerzos en una ventana alrededor del orificio de descarga, a una frecuencia de 2000 Hz. A esta misma frecuencia se tomó la fracción de sólido ϕ en el orificio, dividiendo el ancho de éste en 2048 partes de tal forma que a cada

parte se suma 1 si existe un contacto con un grano y 0 si es un espacio vacío para finalmente promediar al final de la simulación. También se registra la velocidad vertical de cada grano que ha cruzado el orificio y el tiempo que transcurre cuando cruzan 80 granos para obtener el perfil de velocidades verticales y el flujo granular respectivamente.

Los códigos para la simulación y para el análisis de grano grueso fueron escritos en CUDA-C acelerados por GPU usando tarjetas NVIDIA Tesla K40. Se utilizó OVITO [46, 47] para visualizar tanto las simulaciones como los esfuerzos internos obtenidos por grano grueso.

5.2. Validación de las simulaciones

Con el objetivo de que los resultados generados por las simulaciones puedan ser usados para extrapolar los datos obtenidos de forma experimental, comparamos el flujo obtenido con ambos para un silo con un orificio de ancho $D = 1.937$ cm (tolva con $\beta = 0^\circ$). Inicialmente se utilizó un sistema de discos bidimensional, pero no obtuvimos resultados de flujo comparables con los experimentales, por lo tanto se realizaron las simulaciones cuasi-bidimensionales descritas en la sección anterior. Un resultado notable de esto es que se tuvo que considerar la fricción existente entre esferas y los planos frontales y posteriores, la cual no es considerada generalmente en trabajos de este tipo. El coeficiente de fricción entre esferas de acero y el vidrio de los planos utilizados en el experimento (frontal y posterior) no es el mismo que entre esferas de acero o entre esferas de acero y paredes laterales de acero, por lo tanto es un parámetro que debe ser configurado para igualar los resultados experimentales.

En la Figura 5.2 se encuentra el flujo obtenido de simulaciones con 32000 granos variando el coeficiente de fricción grano-plano de 0 a 0.9 con diferente espesor ε (distancia entre los planos) normalizados con el flujo Q_0 obtenido a fricción cero, el cual es equivalente al flujo de las simulaciones 2D. Se puede notar que con un espesor grande el flujo decae más rápido que con espesores pequeños, pero cuando el coeficiente de fricción supera 0.5 la situación se invierte decayendo más rápido con espesores pequeños. En el experimento la separación entre planos es de 1.1 veces el diámetro de las esferas, por lo tanto usamos ese espesor y encontramos un coeficiente de fricción efectivo de 0.23 ajustando el flujo al conseguido experimentalmente para esa misma apertura. Posteriormente variamos la apertura del orificio de descarga con las mismas medidas experimentales. En la Figura 5.3 se encuentra la comparación de los flujos simulados y experimentales para un silo en descarga con 120000

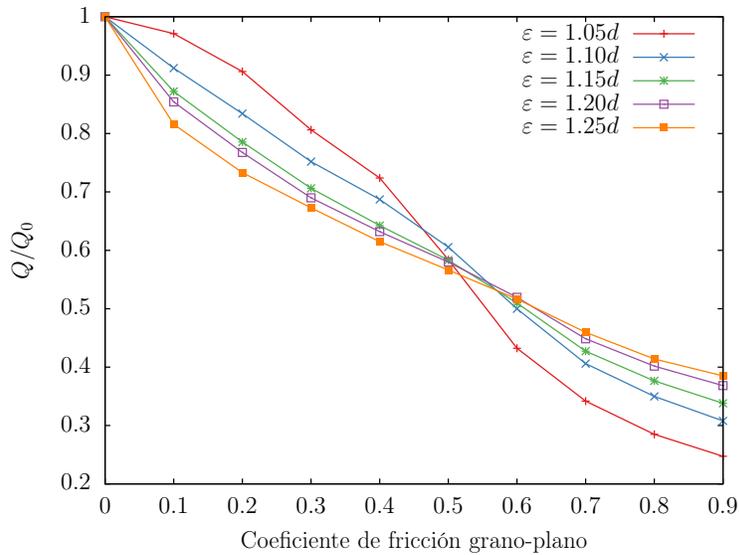


Figura 5.2: Flujo granular normalizado en función de el coeficiente de fricción entre los granos y los planos para simulaciones de silos con diferentes espesores ε descargando esferas monodispersas. Podemos observar que un coeficiente de fricción más grande a 0.5 el flujo disminuye más con espesores pequeños, contrario a coeficientes de fricción pequeños donde el flujo en un espesor grande decae más rápido.

granos. La comparación para diferentes anchos de orificio sigue siendo buena, validando los resultados de las simulaciones al menos para un silo en descarga.

Lo siguiente fue observar que con el mismo coeficiente de fricción grano-plano la comparación del flujo entre simulación y el experimento sigue siendo equivalente para tolvas con ángulo diferente de cero. En la Figura 5.4 tenemos los flujos simulados y experimentales para una tolva con $\beta = 30^\circ$. Los datos del flujo de las simulaciones aún son equivalentes a los experimentales, dando confianza en los códigos el modelo de fuerza utilizados y descritos en el marco teórico; sin embargo para esta tolva se dispone de otros datos experimentales además del flujo, por lo que la validación de las simulaciones puede ser más completa.

Utilizando el método de grano grueso analizamos los datos simulados y experimentales para comparar la fracción de sólido, la magnitud del campo de velocidades y la traza del tensor de esfuerzo cinético en el interior de la tolva cerca del orificio de descarga. La función de grano grueso utilizada fue

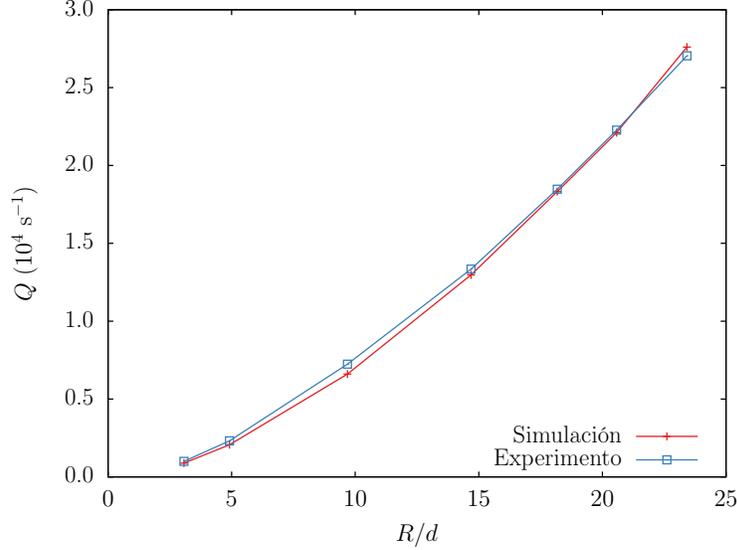


Figura 5.3: Comparación entre los flujos obtenidos por simulaciones y por experimentos para un silo en descarga ($\beta = 0^\circ$). Con un coeficiente de fricción grano-plano de 0.23 obtenemos un flujo muy cercano a los datos experimentales.

una Gaussiana, definida por

$$W(\mathbf{r}) = A_w \exp\left(-\frac{r^2}{2w^2}\right); \text{ si } |\mathbf{r}| = r < c, 0 \text{ de otro modo,} \quad (5.1)$$

con un ancho $w = d$, radio de corte $c = 4w$ y la constante de normalización A_w es obtenida tal que la integral de la función sobre todo el espacio sea la unidad ($\int W(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$). Se utilizó un promedio en el tiempo para disminuir las fluctuaciones temporales, por lo cual una propiedad Ψ es obtenida con

$$\langle \Psi \rangle_t = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} \Psi(\mathbf{r}, t') dt'. \quad (5.2)$$

Como el sistema esta definido en tres dimensiones pero las observaciones de interés se harán en dos (plano x - z), también podemos promediar en la dimensión y de $-\varepsilon/2$ a $\varepsilon/2$; para ahorrar tiempo de computo podemos promediar analíticamente la función de grano grueso siendo $\langle W \rangle_y(x - x_i, z - z_i, t) = \int W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, t) dy$ la función promediada en y . Así solo usamos esta función promediada como función de grano grueso, es decir, $\langle \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle_y = \sum_i \psi_i \langle W(x - x_i, z - z_i, t) \rangle_y$. Más detalles de este procedimiento y de como los

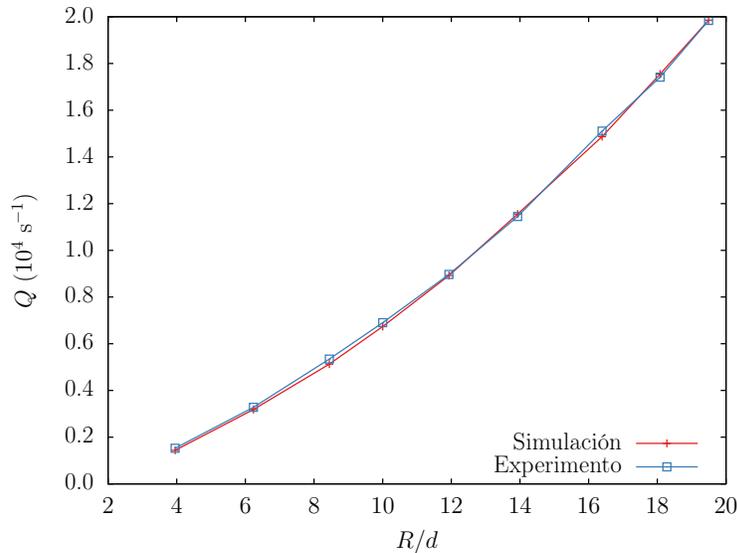


Figura 5.4: Comparación entre los flujos obtenidos por simulaciones y por experimentos para una tolva en descarga con $\beta = 30^\circ$. Podemos notar que los datos son muy parecidos entre simulación y experimento para todo el rango explorado de R (semi-apertura del orificio).

parámetros de grano grueso influyen en el análisis de un sistema en descarga granular, pueden ser vistos en [51].

En la Figura 5.5 presentamos en mapas de colores los resultados de aplicar el método de grano grueso promediando 1 s de datos a un muestreo de 2000 Hz en una tolva de ángulo $\beta = 30^\circ$ y apertura $R = 1.0$ cm. Los mapas están normalizados a sus valores máximos los cuales son presentados en el Cuadro 5.1.

De estos resultados podemos observar que las simulaciones reflejan bastante bien el comportamiento interno de los resultados experimentales, tanto cualitativa como cuantitativamente. En las fracciones de sólido ϕ mostradas en a) y d) de la Figura 5.5 observamos que esta cantidad es bastante homogénea, excepto cuando se acerca al orificio, donde disminuye aproximadamente en un 20%. En las subfiguras b) y e) se encuentra la magnitud del campo de velocidades v donde podemos observar curvas de isovelocidad bien definidas, observando que se encuentran en distintas posiciones entre los resultados simulados y los experimentales; en el simulado se observa que una curva que inicia y termina en los bordes del orificio ubicados en $(1,0)$ y $(-1,0)$ con una

Cuadro 5.1: Valores máximos de los mapas de color de grano grueso presentados en la Figura 5.5.

| Simulación | Experimento |
|---|---|
| $\phi_{\max} = 0.51$ | $\phi_{\max} = 0.52$ |
| $v_{\max} = 54$ cm/s | $\phi_{\max} = 52$ cm/s |
| $\text{Tr} [\sigma^k]_{\max} = 11.0$ N/m ² | $\text{Tr} [\sigma^k]_{\max} = 13.2$ N/m ² |

altura de aproximadamente $1.5R$, en los resultados experimentales la altura llega a más de $2R$. Por último en la traza del tensor de esfuerzos cinéticos σ^k podemos observar dos zonas de “calentamiento” donde las fluctuaciones con la velocidad promedio son grandes, las cuales son características observadas en sistemas en flujo como el estudiado aquí; estas zonas se encuentran cerca de los bordes del orificio y tienen su máximo a una distancia de un radio de grano de los bordes.

En la literatura se ha reportado el comportamiento de los perfiles de velocidad y de fracción de sólido en un amplio rango de aperturas para silos en descarga [52]. Estos perfiles pueden ser ajustados a las siguientes expresiones

$$v_z(x) = v_c[1 - (x/R)^2]^{1/\eta} \quad (5.3)$$

$$\phi(x) = \phi_c[1 - (x/R)^2]^{1/\nu}, \quad (5.4)$$

donde v_c y ϕ_c con los valores de velocidad y de fracción de sólido en el centro del orificio, η y ν son exponentes de ajuste. Por otro lado los valores centrales se ajustan a

$$v_c(R) = \sqrt{2\gamma g R} \quad (5.5)$$

$$\phi_c(R) = \phi_\infty(1 - \alpha_1 e^{-R/\alpha_2}), \quad (5.6)$$

donde $\alpha_{1,2}$ y γ son parámetros de ajuste, ϕ_∞ es el valor asintótico de la fracción de volumen para orificios grandes. El parámetro γ es relacionado al concepto de “arco de caída libre” como se menciona en el capítulo de marco teórico. En la Figura 5.6 y la Figura 5.7 se presenta la comparación de los datos simulados y experimentales para el perfil de velocidades y la fracción de sólido en el orificio respectivamente con los ajustes de las ecuaciones (5.3) y (5.4).

En los ajustes del perfil de velocidades verticales podemos observar que los datos experimentales y simulados son muy parecidos cuando el parámetro

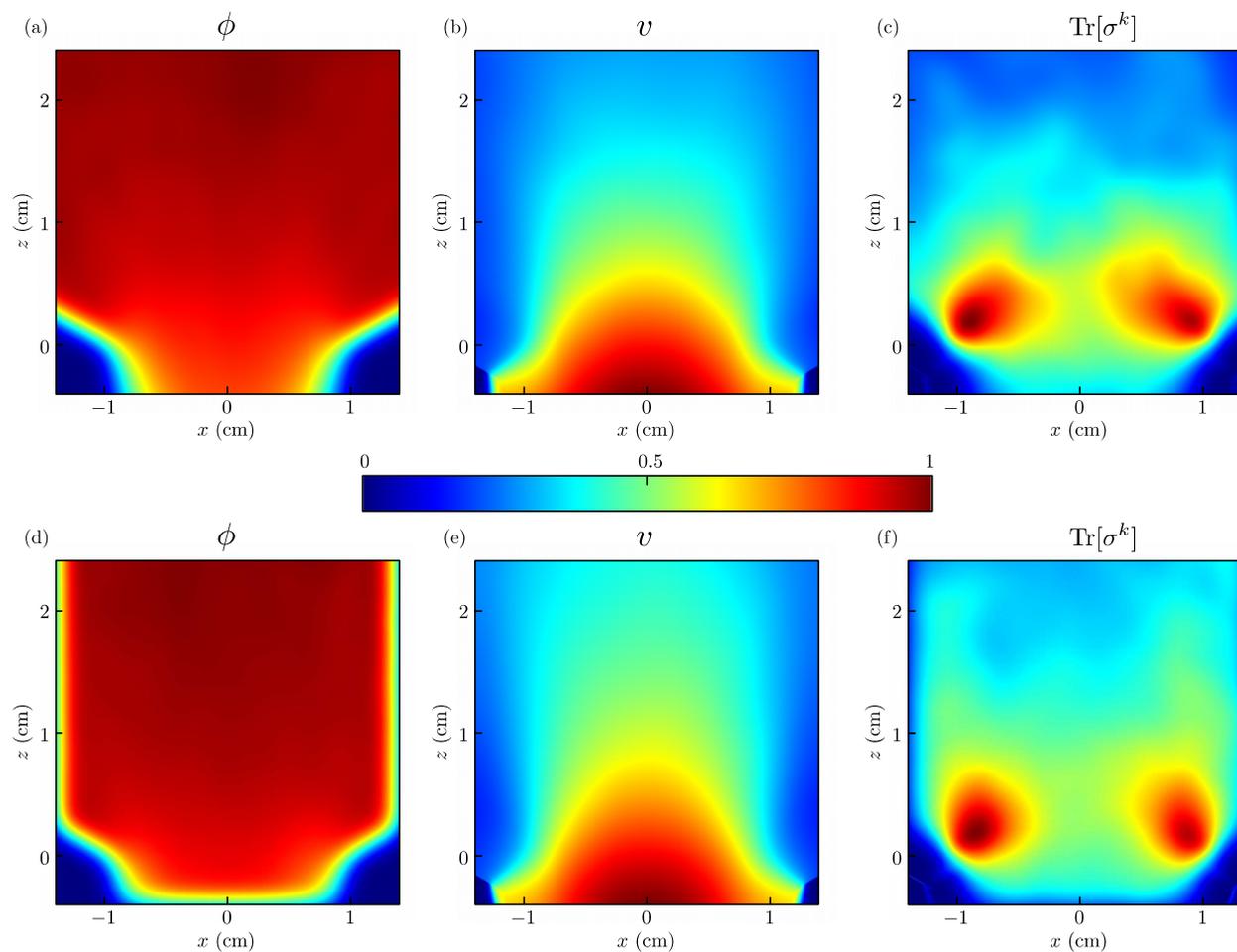
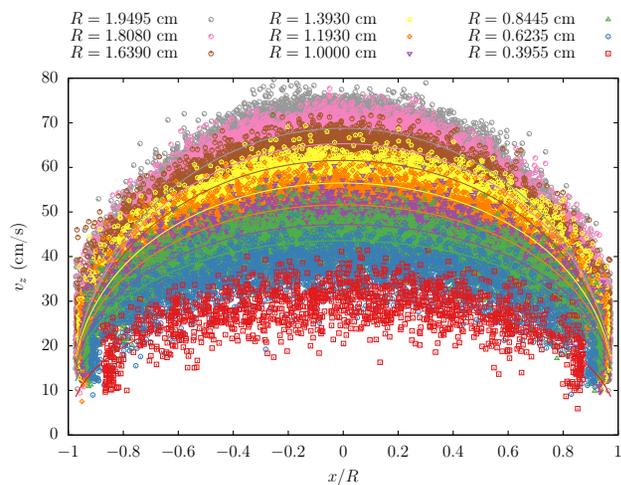
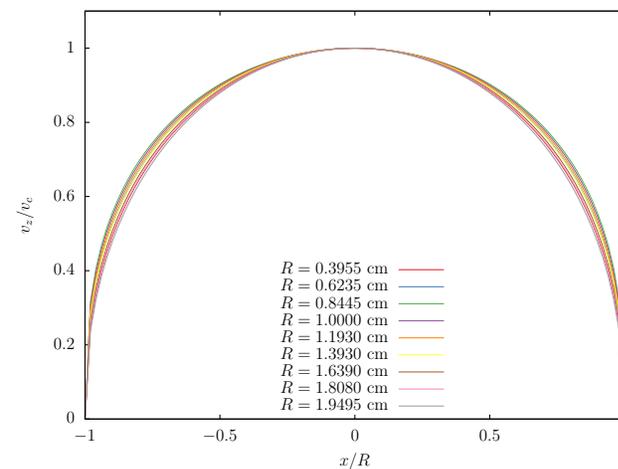


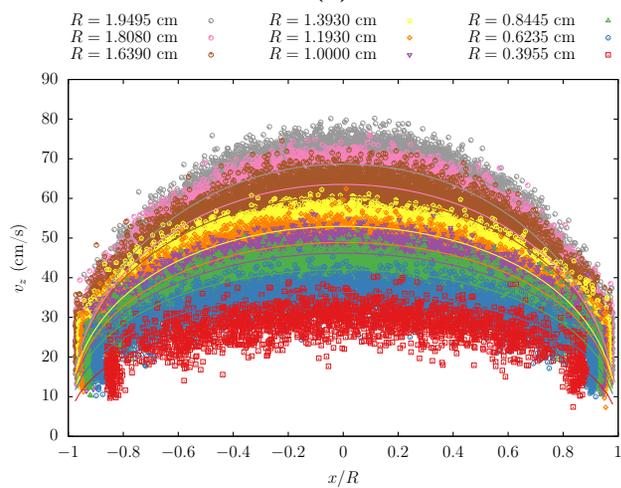
Figura 5.5: Mapa de colores de los resultados obtenidos al aplicar el método de grano grueso a una tolva con ángulo $\beta = 30^\circ$, $R = 1.0$ cm y promediando por todo el espesor $\varepsilon = 0.11$ cm y en 1 s de tiempo. Los valores son normalizados a sus máximos los cuales son presentados en el Cuadro 5.1. Arriba los resultados de simulación para a) la fracción de sólido ϕ , b) la magnitud v del campo de velocidades, y c) la traza del tensor de esfuerzo cinético σ^k . Abajo los resultados experimentales. El comportamiento interno del sistema en la simulación refleja lo que sucede en el experimento. En v podemos observar curvas definidas de isovelocidad. La traza de σ^k presenta dos zonas de “calentamiento” cerca del orificio ($z = 0$), las cuales son características de estos sistemas en flujo.



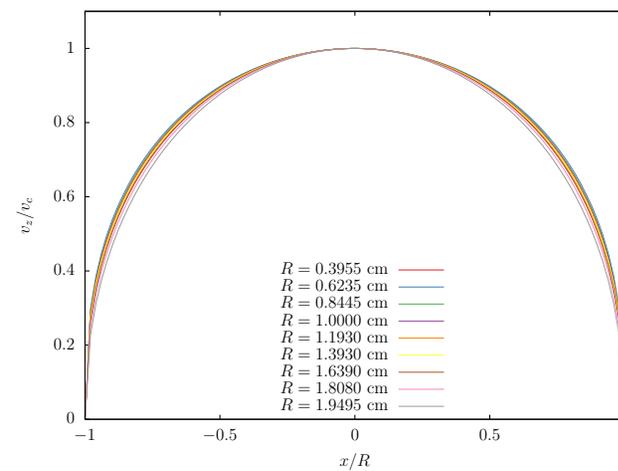
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.6: Perfil de velocidades verticales en el centro para los datos simulados (arriba) y los experimentales (abajo) para diferentes aperturas. Los ajustes colapsados son mostrados en (b) y (d).

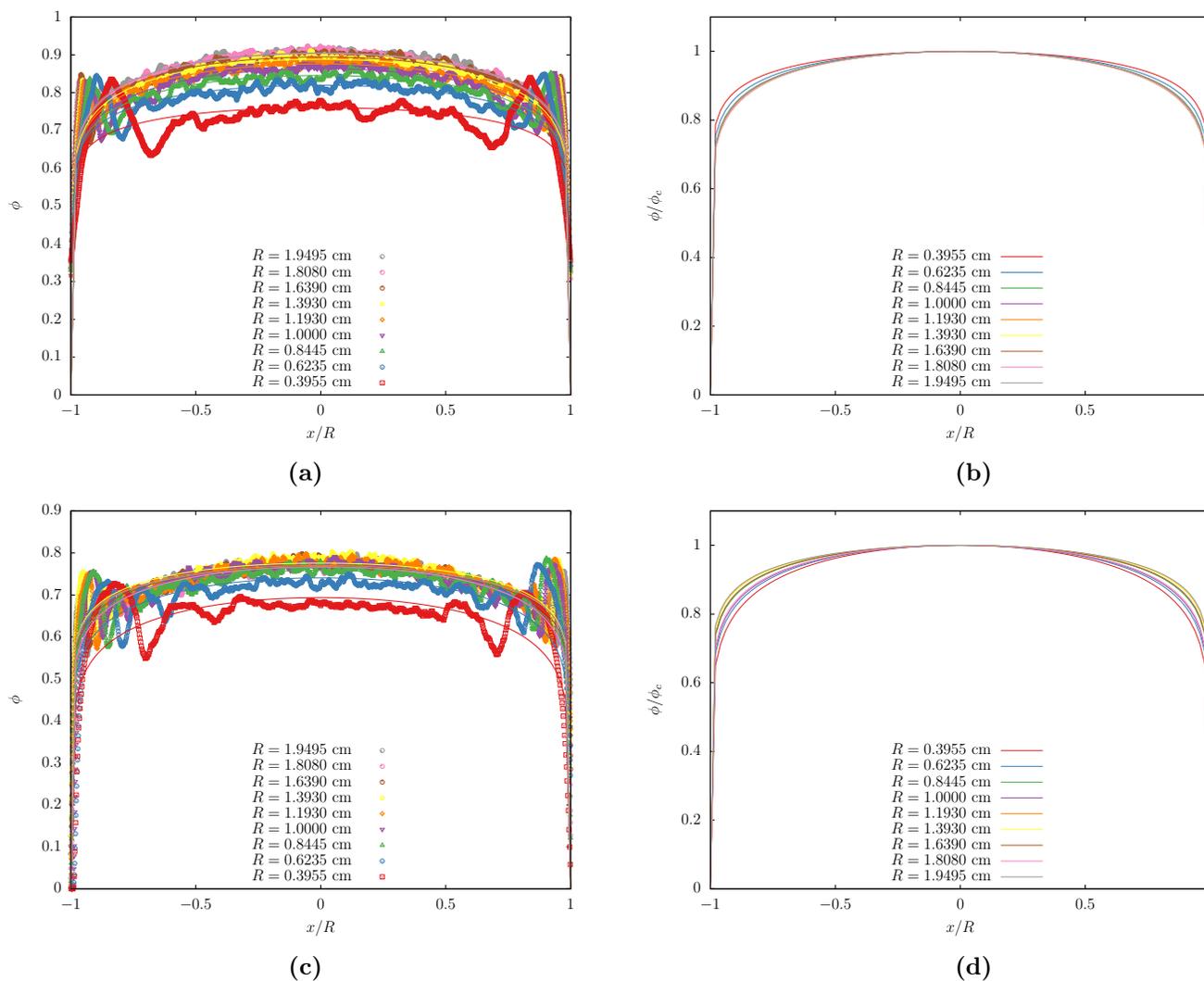


Figura 5.7: Perfil de la fracción de sólido en el centro para los datos simulados (arriba) y los experimentales (abajo) para diferentes aperturas. Los ajustes colapsados son mostrados en (b) y (d). Los picos observados en cerca de los bordes se debe a que los centros de masa de los granos no pueden tocar esos bordes debido al contacto producido a un radio de grano de distancia.

$1/\eta$ varía de 0.35 a 0.45; este resultado es diferente a los resultados encontrados para silos en descarga donde se espera que el parámetro ajuste $1/\eta = 0.5$. Las fracciones de sólido en el orificio, para los datos simulados y experimentales, aunque tiene un comportamiento similar, muestran máximos distintos; para los datos simulados llega alrededor de 0.9 mientras para los datos experimentales llega hasta un máximo alrededor de 0.8. Los parámetros de ajuste $1/\nu$ van de 0.7 a 0.13 donde otra vez difiere con los silos en descarga donde el valor esperado es 0.2.

En la Figura 5.8 se muestran las velocidades centrales encontradas en el ajuste del perfil de velocidades verticales; estas velocidades se ajustaron usando la ecuación (5.5). Los datos experimentales y simulados concuerdan y presentan un buen ajuste con $\gamma = 1.11 \pm 0.02$ para los experimentales y $\gamma = 1.18 \pm 0.01$ para los simulados, lo cual es mayor a 1 esperado en la teoría del arco de caída libre.

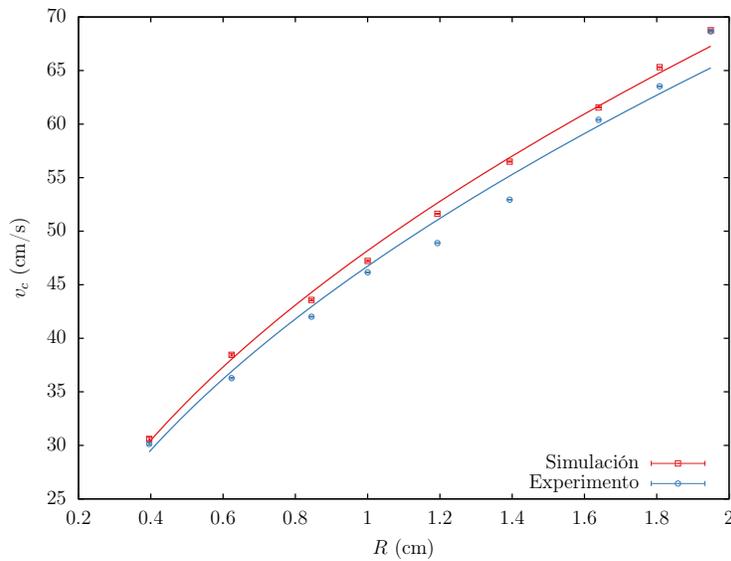


Figura 5.8: Velocidad en el centro del orificio de la tolva con $\beta = 30^\circ$ para distintos tamaños de apertura. La línea sólida es el mejor ajuste de la ecuación (5.5).

En la Figura 5.9 se pueden observar los datos de la fracción de sólido en el centro del orificio, y el mejor ajuste usando la ecuación (5.6) para los datos experimentales y los simulados. Se puede notar que en los experimentos se ha llegado al valor de saturación $\phi_\infty = 0.77 \pm 0.002$ para aperturas grandes, mientras que en las simulaciones aún no se llega a este valor, que es más

alto, siendo $\phi_\infty = 0.91 \pm 0.003$. Los parámetros de ajuste son diferentes igualmente, en los experimentos $\alpha_1 = 0.61 \pm 0.17$ y $\alpha_2 = 0.22 \pm 0.03$ mientras que en las simulaciones $\alpha_1 = 0.34 \pm 0.02$ y $\alpha_2 = 0.53 \pm 0.03$.

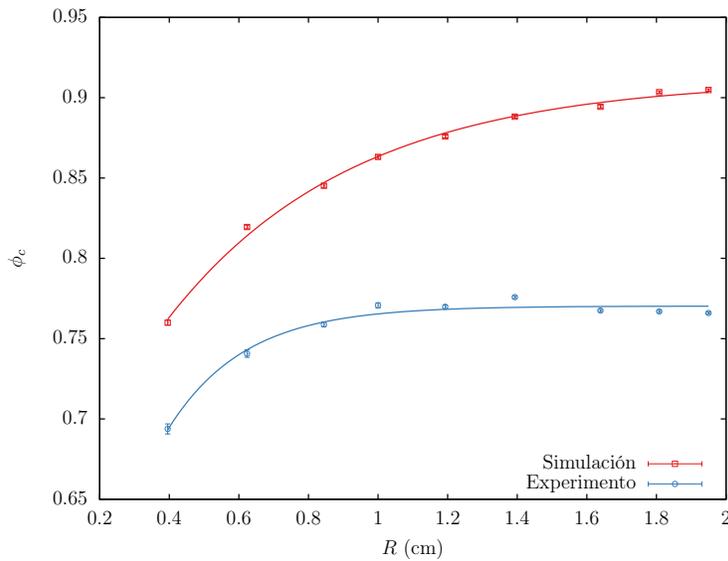


Figura 5.9: Fracción de sólido en el centro del orificio de la tolva con $\beta = 30^\circ$ para distintos tamaños de apertura. La línea sólida es el mejor ajuste de la ecuación (5.6).

5.3. Variando el ángulo de la tolva

Luego de observar que las simulaciones son una buena aproximación a los resultados obtenidos por experimentos podemos extender los resultados variando el ángulo β de la tolva y diferentes tamaños de apertura. El procedimiento de análisis es el mismo que el utilizado en la comparación entre experimento y simulación. Realizamos el ajuste correspondiente a los perfiles de velocidad vertical en el orificio para todos los sistemas y capturamos la velocidad en el centro. La Figura 5.10 muestra los datos de las velocidades centrales en el orificio para tolvas de diversos ángulos y aperturas. Podemos observar que los ajustes son buenos y que para tolvas con ángulos menores que 60° el comportamiento es parecido sugiriendo que la velocidad que se alcanza en el centro en la descarga se vuelve independiente del ángulo de apertura.

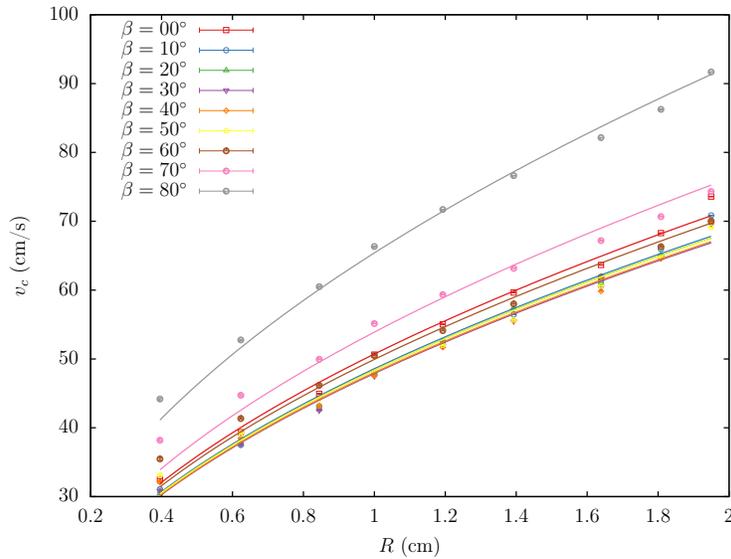


Figura 5.10: Velocidad en el centro del orificio para orificio de distintos tamaños y tolvas con diferentes ángulos de apertura. Las líneas sólidas son los mejores ajustes de la ecuación (5.5).

La Figura 5.11 muestra los datos de la fracción de sólido en el centro del orificio para tolvas con diferentes ángulos y aperturas. Podemos observar que entre 0° y 30° estos valores son muy parecidos y no hay un cambio relevante. Para ángulos mayores que 30° la fracción de sólido se eleva indicando que la densidad del material que pasa por el centro del orificio es cercana a la densidad de bulbo. Los valores de ajuste de los diferentes sistemas para la velocidad y fracción de sólido central se encuentran en el Cuadro 5.2.

Obtuvimos el tensor de esfuerzos cinético y de contacto para los diferentes sistemas aplicando el método de grano grueso de la misma forma que como se explico en la sección anterior utilizando las ecuaciones (3.50) y (3.47) con una función Gaussiana. En este caso podemos considerar el esfuerzo de contacto debido a que en las simulaciones tenemos acceso a las fuerzas de interacción que existen en el punto de contacto entre los granos y las paredes; en los experimentos no es posible acceder fácilmente a esta información. Debido a la simetría del sistema podemos considerar observar solo una mitad, así que además de promediar en el tiempo y en la dirección y podemos promediar la mitad $x < 0$ con la mitad $x > 0$. En las Figuras 5.12, 5.13 y 5.14 podemos observar los mapas de colores de la traza del tensor de esfuerzos cinéticos y

Cuadro 5.2: Valores de ajuste para los diferentes sistemas.

| β | γ | ϕ_∞ | α_1 | α_2 |
|---------|-------------|---------------|---------------|-------------|
| 0° | 1.31 ± 0.02 | 0.928 ± 0.008 | 0.351 ± 0.019 | 0.68 ± 0.07 |
| 10° | 1.20 ± 0.02 | 0.922 ± 0.002 | 0.353 ± 0.007 | 0.65 ± 0.02 |
| 20° | 1.19 ± 0.02 | 0.921 ± 0.004 | 0.333 ± 0.012 | 0.65 ± 0.04 |
| 30° | 1.17 ± 0.02 | 0.909 ± 0.003 | 0.375 ± 0.019 | 0.51 ± 0.03 |
| 40° | 1.17 ± 0.02 | 0.915 ± 0.003 | 0.314 ± 0.016 | 0.55 ± 0.04 |
| 50° | 1.19 ± 0.02 | 0.920 ± 0.001 | 0.262 ± 0.004 | 0.59 ± 0.01 |
| 60° | 1.27 ± 0.03 | 0.922 ± 0.002 | 0.232 ± 0.009 | 0.54 ± 0.03 |
| 70° | 1.48 ± 0.03 | 0.934 ± 0.004 | 0.211 ± 0.017 | 0.56 ± 0.07 |
| 80° | 2.18 ± 0.03 | 0.953 ± 0.001 | 0.258 ± 0.007 | 0.50 ± 0.01 |

de contacto para diferentes ángulos y una apertura $R = 1.0$ cm. Los mapas están normalizados con los valores más altos obtenidos, que son los de la tolva con $\beta = 0^\circ$. Primero podemos observar que el esfuerzo de contacto es al menos dos ordenes de magnitud más grande que el cinético por lo que la presión del sistema es predominado por este esfuerzo de contacto. Observamos que conforme el ángulo de apertura aumenta el esfuerzo de contacto disminuye puesto que con ángulos grandes como el de 80° todas las partículas se mueven, es decir, que el flujo es másico (no existen zonas estáticas con contactos de larga duración), cosa que no ocurre con un silo ($\beta = 0^\circ$) donde el flujo es de tipo embudo. Por otro lado las zonas de máximo esfuerzo cinético con forma de lóbulo se mantiene para ángulos menores a 60° , y no se nota un cambio de posición estando cerca del borde, para ángulos mayores esta zona se difumina hasta el punto de que para 80° es irrelevante.

Escogiendo el centro del orificio ($x = 0$) podemos capturar los datos de la traza a lo largo de la altura z . En la Figura 5.15 se presentan los perfiles de estas “presiones” para los diferentes ángulos de apertura. La Figura 5.15(a) evidencia un máximo para todos los sistemas donde esta bien definida una transición en la que disminuye el esfuerzo cinético a una altura alrededor de $0.5R$. Por otro lado el esfuerzo de contacto en la Figura 5.15(b) decae monótonicamente para todos los sistemas y es independiente del ángulo de apertura al menos para una altura de $z < R$, en alturas mayores los ángulos de 0 , 70 y 80° tienen un esfuerzo de contacto ligeramente menor que los demás.

En la Figura 5.16 se compara el esfuerzo cinético de los diversos ángulos normalizados con su máximo. Podemos observar que la posición del máximo

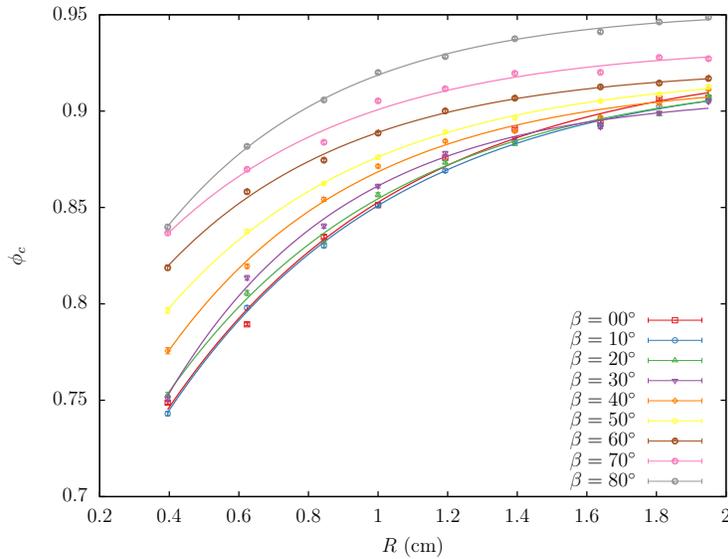


Figura 5.11: Fracción de sólido en el centro del orificio para orificios de distintos tamaños y tolvas con diferentes ángulos de apertura. Las líneas sólidas son los mejores ajustes de la ecuación (5.6).

varía para cada ángulo en el rango entre $z = 0.2$ y $z = 0.8$. Para alturas mayores este esfuerzo cinético disminuye, sin embargo no parece haber mucha variación en las tolvas de 70° y 80° donde solo se nota una variación de aproximadamente 20 % a lo largo de toda la altura. Si observamos la posición en z de los valores máximos para los perfiles con un mismo valor de x , podemos obtener los arcos donde existe esta transición en el esfuerzo cinético. La Figura 5.17 muestra la altura z_m donde se encuentra el máximo de $\text{Tr}[\sigma^k]$ en función de la dirección horizontal x . Las líneas sólidas son el ajuste de una función $\sim [1 - (x/R)^2]^E$. Para ángulos $\beta > 40^\circ$ el ajuste no es bueno. Para los ángulos 0 y 30° el parámetro de ajuste E es cercano a 1, por lo que el arco formado es parecido a una parábola. Los ángulos 10 , 20 y 40° tienen un parámetro de ajuste E cercano a 0.5, por lo que el arco formado es parecido a una elipse.

Por último en la Figura 5.18 presentamos los flujos Q para tolvas con orificios de diferente tamaño en función del ángulo de apertura β normalizado con su respectivo flujo para un ángulo $\beta = 0^\circ$. Podemos observar que existe un mínimo entre 10° y 30° el cual es ligeramente menor al flujo de un silo en descarga; sin embargo la diferencia es de menos del 10 %. Este mínimo cambia

conforme el orificio crece, ubicándose alrededor de 30° aún aumentando el tamaño del orificio; este es un resultado que se esperaba de los resultados propuestos por la teoría del arco de caída libre; sin embargo para orificios pequeños no parece concordar puesto que ese mínimo se desplaza a 10° . La presencia de este mínimo indica que existe un ángulo de apertura el cual tiene el mismo flujo que un silo en descarga (0°) y que se podrían considerar sistemas equivalentes. En ángulos mayores a 50° es donde se obtiene un flujo considerablemente más grande que un silo en descarga, cuando el orificio es pequeño el aumento de flujo es evidente, sin embargo con el orificio más grande el flujo no supera el 10 % del silo en descarga hasta ángulos mayores a 60° .

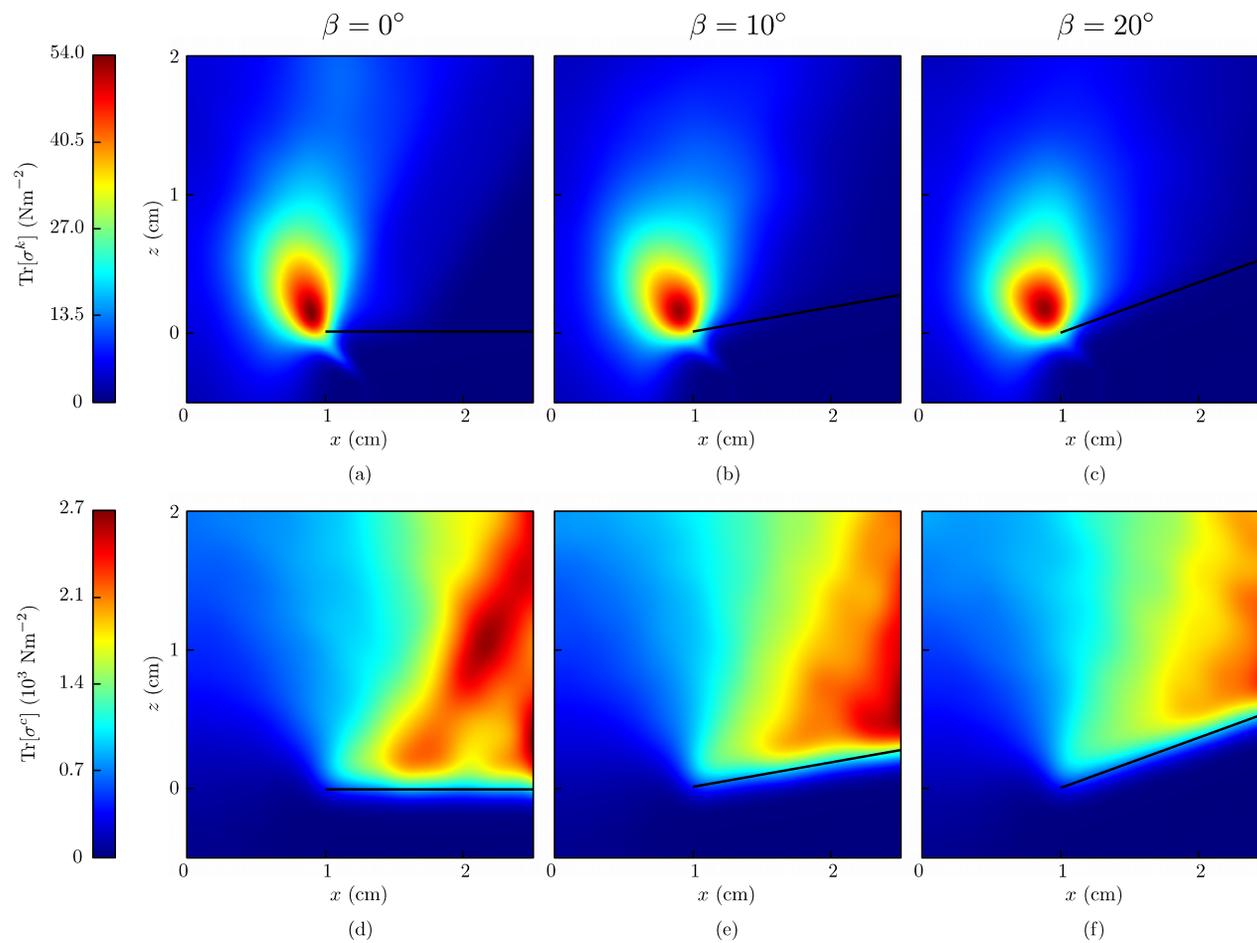


Figura 5.12: Traza del tensor de esfuerzo cinético (arriba) y de contacto (abajo) para una tolva con apertura $R = 1.0$ cm y ángulos $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ$. La línea negra interior representan la pared inclinada de la tolva de cada caso.

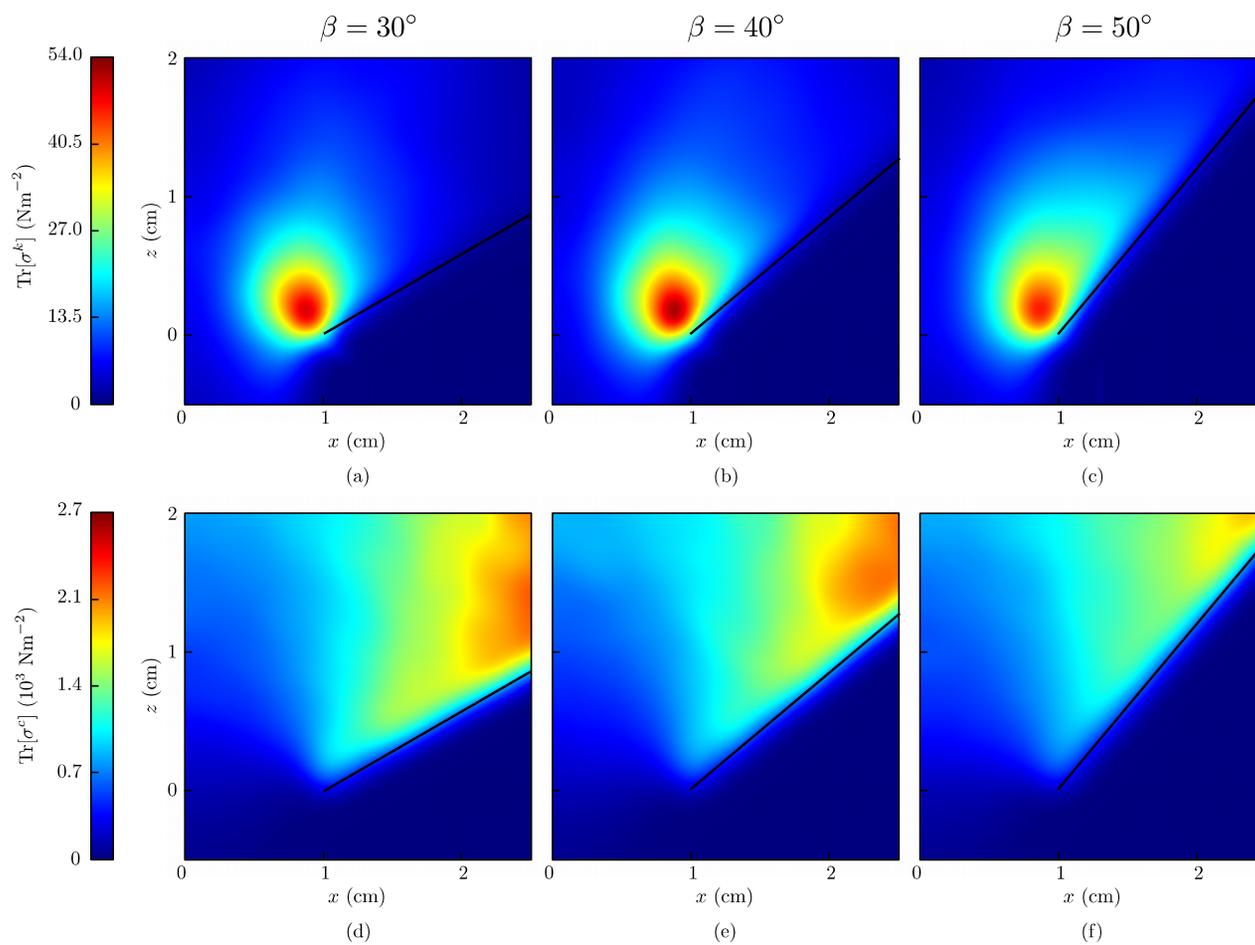


Figura 5.13: Traza del tensor de esfuerzo cinético (arriba) y de contacto (abajo) para una tolva con apertura $R = 1.0$ cm y ángulos $\beta = 30^\circ$, 40° , 50° . La línea negra interior representan la pared inclinada de la tolva de cada caso.

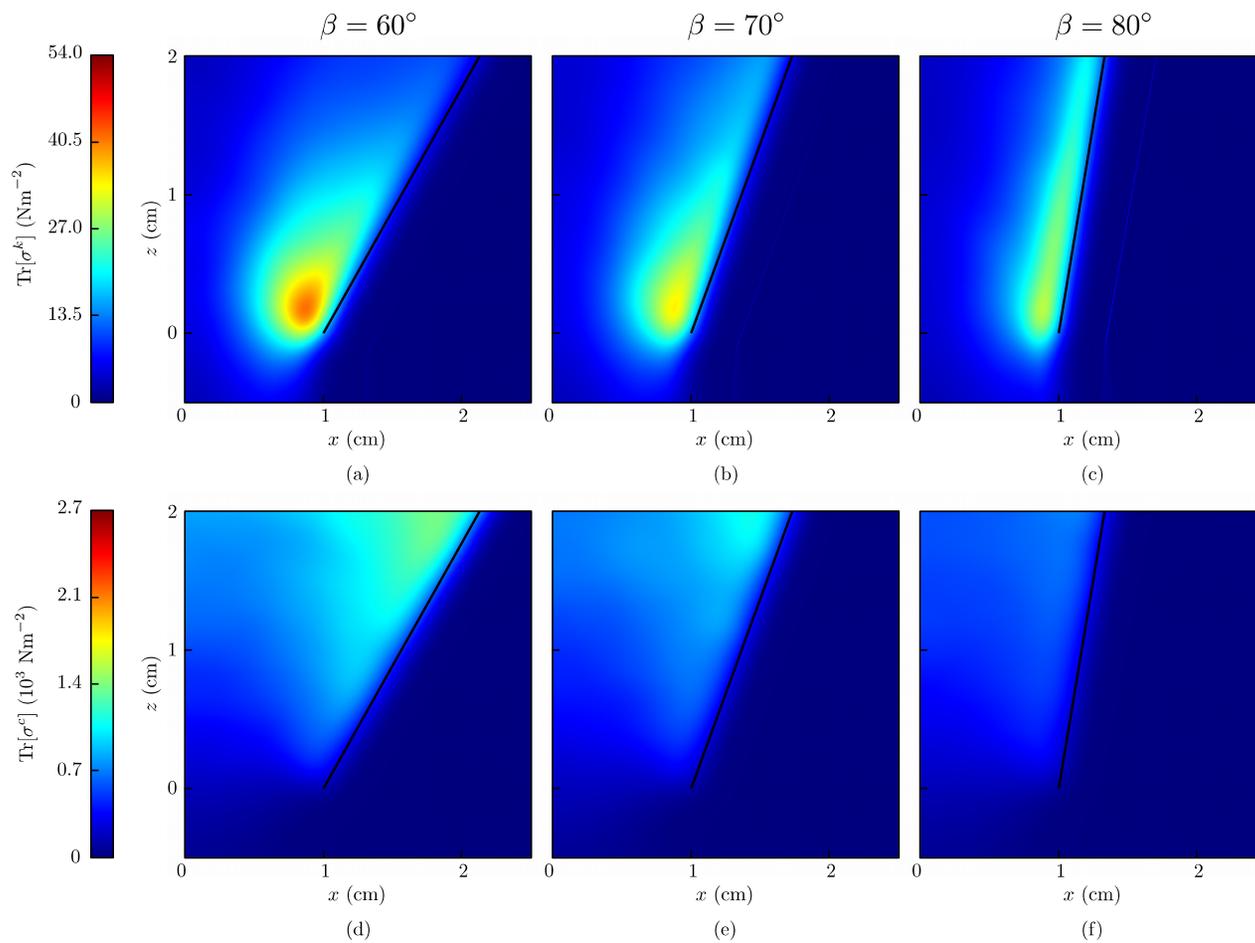
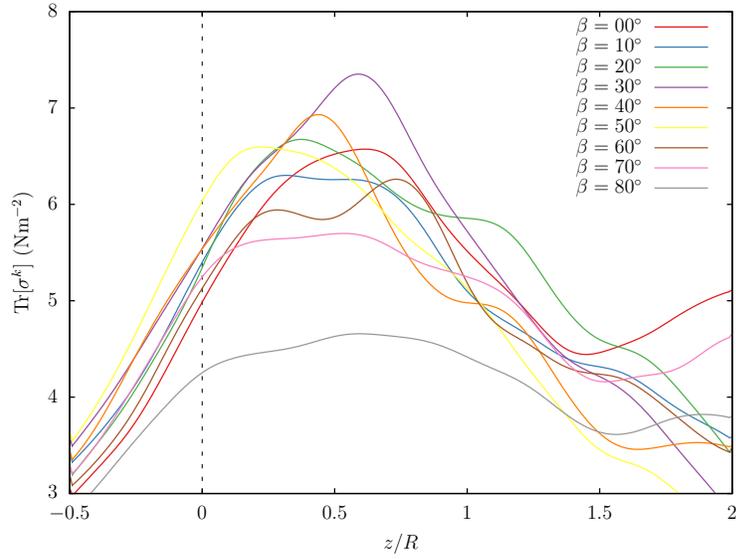
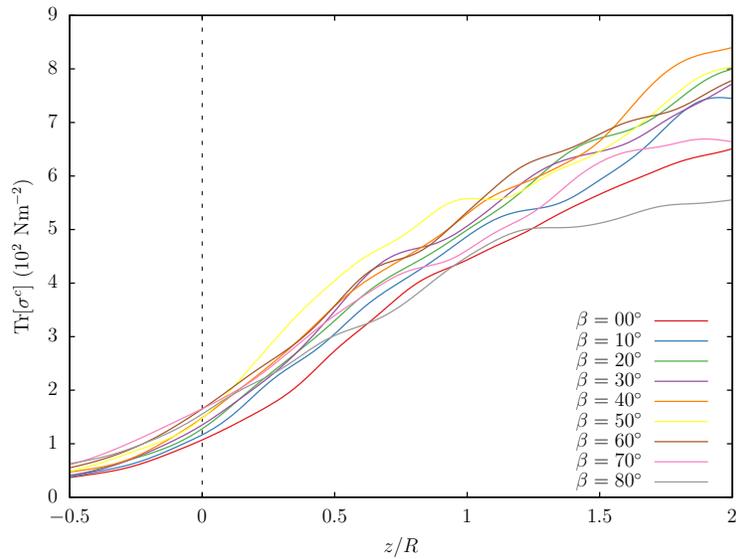


Figura 5.14: Traza del tensor de esfuerzo cinético (arriba) y de contacto (abajo) para una tolva con apertura $R = 1.0$ cm y ángulos $\beta = 60^\circ, 70^\circ, 80^\circ$. La línea negra interior representan la pared inclinada de la tolva de cada caso.



(a)



(b)

Figura 5.15: Perfiles de la “presión” (a) cinética y (b) de contacto conforme aumenta la altura en el centro del orificio $x = 0$ para diferentes ángulos de apertura. La línea punteada es la posición en z del orificio. La apertura es $R = 1.0$ cm.

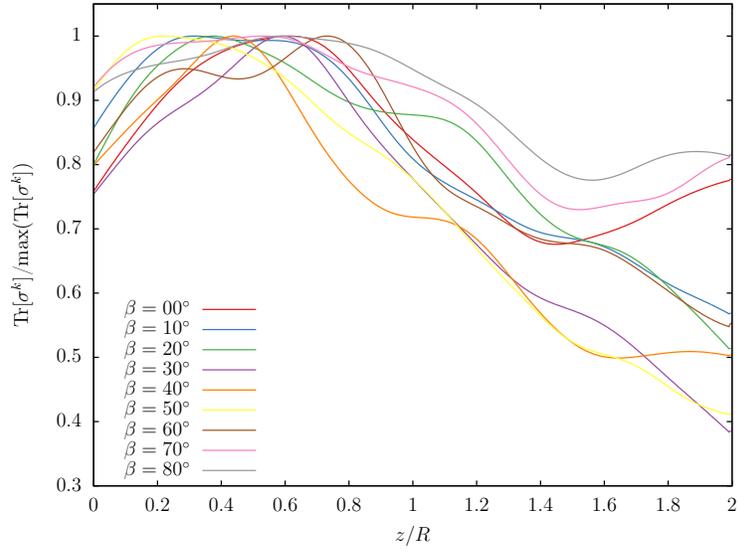


Figura 5.16: Perfiles de las trazas de esfuerzo cinético en función de la altura z en el centro del orificio $x = 0$ colapsados con sus máximos.

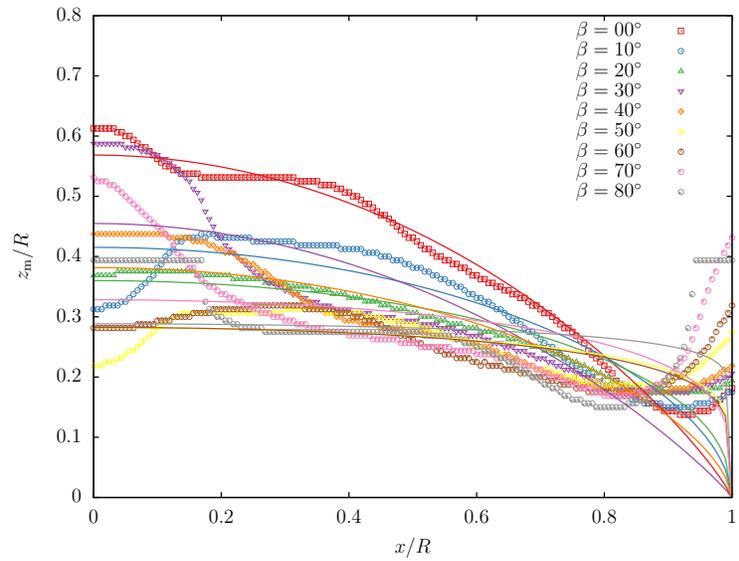


Figura 5.17: Altura z_m del máximo del tensor de esfuerzo cinético en función de la dirección vertical para los sistemas con diferentes ángulos de apertura.

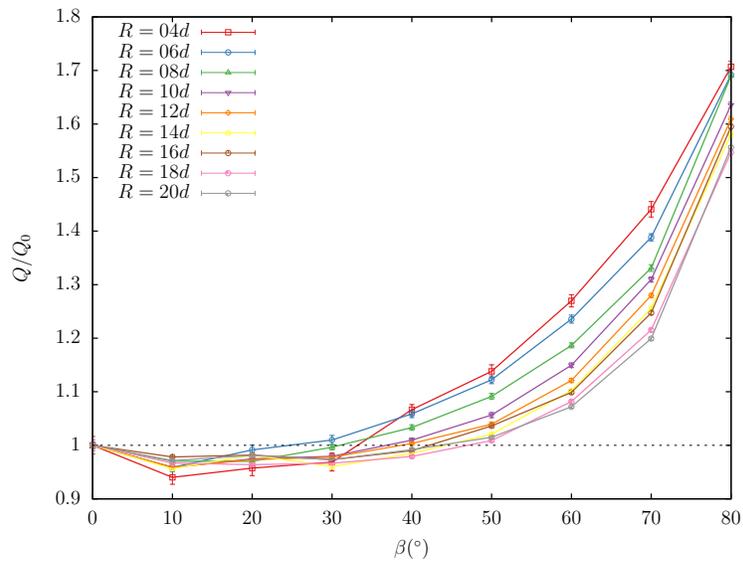


Figura 5.18: Flujos para sistemas con diferente tamaños de orificio en función del ángulo de apertura β normalizado con el flujo Q_0 de un silo en descarga ($\beta = 0^\circ$). Se puede observar que existe un mínimo en $\beta > 0^\circ$.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

Las simulaciones de silos bidimensionales llenos de discos con diferentes coeficientes de fricción estáticos muestran un buen ajuste al modelo de Janssen, alcanzando la saturación del esfuerzo normal en la base, como un resultado de la fricción entre granos y paredes. Estos resultados son en general como indica el modelo, y una disminución en el coeficiente de fricción estática tiende a dar un comportamiento hidrostático, algo que también es esperado. No está de más recalcar que estos resultados no podrían obtenerse solamente implementando una fricción dinámica, de este modo obtendríamos un comportamiento hidrostático; la implementación de la fricción estática (usando la aproximación de Cundall-Strak) fue crucial para observar la saturación de presión en la base del silo. El valor de K tiende a uno para valores pequeños de fricción, y cero para los valores grandes. El parámetro α incluido en este trabajo no se desvía mucho de 1, pero un buen ajuste requiere $\alpha \leq 1$.

Una variación en dispersidad de radios no tiene efecto significativo, y el modelo de Janssen parece independiente de la polidispersidad. Sin embargo, el modelo necesita ser explorado para un rango más amplio de dispersidad, y claramente no hay conclusiones hechas para casos de cristalización.

Cuando la relación de aspecto de altura a ancho z/L es mantenido, pero los valores de z y L son cambiados, los parámetros K y α cambian fuertemente y, en principio, el modelo de Janssen ya no representa tan bien los resultados de la simulación. Estos resultados parecen indicar que si $L \rightarrow \infty$, la presión en el fondo será hidrostática (incluso con la relación de aspecto fija); la fricción pierde importancia. Por otro lado, si z es mantenida y L incrementa, el esfuerzo normal en el fondo tiende a su límite hidrostático, en concordancia con el límite de pequeños valores de z/L del modelo de Janssen. Estos resultados sugieren que para sistemas más grandes (en z y en L),

el modelo de Janssen es menos aplicable.

En estas simulaciones, cuando la base es movida hacia abajo, las paredes están sujetas a grandes esfuerzos normales en medio de la columna granular, y a grandes esfuerzos tangenciales cerca de la base, los esfuerzos tangenciales cuando se llega a la mitad superior de la columna cambian de dirección comparado con el esfuerzo tangencial cerca de la superficie. La distribución de esfuerzos internos hace evidente que la concentración de esfuerzo normal es en medio de la dirección horizontal y alrededor de $2/3$ de profundidad de la columna granular, medida desde la superficie. El esfuerzo tangencial es máximo cerca de las paredes y mínimo en la mitad del ancho de la columna; estos efectos son muy notorios para sistemas grandes.

Hay dos resultados notorios en estas simulaciones. El primero es la presencia de avalanchas internas en el silo, asociadas particularmente al protocolo utilizado, es decir, de una base lentamente descendente. Podemos remarcar de nuevo que estas avalanchas no fueron observadas debido a la resolución de los datos experimentales del trabajo análogo de Bertho y colaboradores [17]. También se puede notar que, como se esperaba, el fondo descendente mantiene una fuerza tangencial grano-pared totalmente movilizada. Un problema intrigante es la estadística de las avalanchas, la cual parece variar ampliamente en tamaño. Esto puede ser considerarse en un trabajo futuro. El segundo es la similitud del comportamiento de la presión en el fondo del silo cuando se incrementa la base, manteniendo z/L fijo, con el mismo comportamiento cuando el radio promedio disminuye, manteniendo la masa: ambos tienden al límite hidrostático. El esfuerzo tangencial sobre las paredes parece saturar si disminuimos el radio promedio y el esfuerzo normal sobre las paredes llega a ser más pequeño; esto implica que la longitud de las cadenas de fuerza no alcanzan las paredes y la mayoría del peso es soportado por la parte media de la base.

El método de simulación usado ha sido exitosamente verificado para las simulaciones de tolvas cuasi-bidimensionales, puesto que tanto cualitativa como cuantitativamente los sistemas simulados reflejan los resultados experimentales del flujo, del campo de velocidades, del esfuerzo cinético interno, y de los perfiles de velocidad y fracción de sólido en el orificio de descarga. Un resultado notable de esta validación, es que se necesitó implementar una fricción entre los granos con los paneles frontal y posterior; esta fricción es normalmente despreciada en los cálculos que se realizan en este tipo de sistemas y son frecuentemente estudiados numéricamente con simulaciones bidimensionales.

Variar el ángulo de las tolvas muestra diferentes resultados que no concuerdan con los modelos más utilizados en la literatura. Con los ajustes de

la velocidad vertical en el centro del orificio de descarga nos muestra un parámetro $\gamma > 1$ indicando que los granos en el centro no se encuentran en simple caída libre, obteniendo un impulso hacia abajo posiblemente por la compresión existente a sus alrededores, soportando los resultados publicados en [33]. Además, la velocidad en el centro parece ser independiente del ángulo de apertura de la tolva. Los ajustes de la fracción de sólido en el centro muestran resultados diferente al presentado en silos en descarga en trabajos como [52, 53] donde obtenemos valores asintóticos altos y curvas diferentes.

El esfuerzo de contacto interno se hace menos relevante cuando se aumenta el ángulo de apertura de la tolva, como se esperaba, sugiriendo una transición de flujo de embudo a un flujo másico donde no existen zonas de material estático. Por otro lado, el esfuerzo cinético interno no muestra grandes variaciones para ángulos menores a 60° , evidenciando zonas de máximos en forma de lóbulos. Capturando la posición de los máximos esfuerzos cinéticos a lo largo de la horizontal pudimos observar las curvas de transición entre un aumento a una disminución de esfuerzo cinético. Para ángulos de 10° , 20° y 40° las curvas son parecidas a una elipse, mientras que para 0° y 30° la curva de ajuste es parecida a una parábola; los ángulos más grandes no se ajusto a ninguna de las dos tipos de curva.

En los flujos obtenidos observamos un mínimo en $\beta > 0^\circ$ sugiriendo que existe una tolva de cierto ángulo que es equivalente a un silo en descarga. Cuando el tamaño de apertura es grande comparado con el tamaño de los granos el comportamiento del flujo al variar el ángulo de la tolva es parecido por lo menos hasta ángulos de 60° , esto sugiere que el efecto del ángulo sobre el flujo es el mismo independientemente del ancho del orificio de al menos doce veces el tamaño de un grano.

Los resultados obtenidos y presentados en esta tesis generan perspectivas a futuro. Sería interesante estudiar como las dimensiones de los granos comparadas con las dimensiones del silo, afectan los esfuerzos internos en simulaciones 3D. Observar y determinar la transición donde las paredes dejen de ser relevantes para los esfuerzos en la columna granular no ha sido reportado. También surge la duda de si en algún momento de esa transición, el esfuerzo sobre las paredes será nulo; esto es, si es posible obtener una columna granular con todo el peso en la base comportándose como un sólido en reposo. Por otro lado, en el estudio de descarga de granos en tolvas de diferentes ángulos se obtuvieron datos que aún pueden dar información adicional, como determinar la forma de los arcos de máximo esfuerzo cinético para los distintos tamaños de orificios. También se necesita de una expresión que prediga el flujo de tolvas de diferentes ángulos obtenida a partir de las propiedades micromecánicas del sistema, esto puede ser estudiado con

la fracción de sólido y las velocidades de los granos justo en el orificio de descarga. Cabe aclarar que los resultados de las tolvas fueron obtenidos con esferas monodispersas formando regiones de cristalización, por lo que implementar polidispersidad evitaría cristalización pudiendo obtenerse distintos resultados.

Bibliografía

- [1] Jacques Duran. *Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials*. Springer Science & Business Media, New York, 2000.
- [2] Bruno Andreotti, Yoël Forterre, and Olivier Pouliquen. *Granular media: between fluid and solid*. Cambridge University Press, 2013.
- [3] Heinrich M Jaeger, Sidney R Nagel, and Robert P Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68(4):1259, 1996.
- [4] Pierre-Gilles de Gennes. Granular matter: a tentative view. *Reviews of Modern Physics*, 71(2):S374, 1999.
- [5] Robert Leslie Brown and John Colin Richards. *Principles of powder mechanics: essays on the packing and flow of powders and bulk solids*. Oxford: Pergamon press, 1970.
- [6] Isaac Goldhirsch and G Zanetti. Clustering instability in dissipative gases. *Physical review letters*, 70(11):1619, 1993.
- [7] James B Knight, Heinrich M Jaeger, and Sidney R Nagel. Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection. *Physical review letters*, 70(24):3728, 1993.
- [8] Matthias Sperl. Experiments on corn pressure in silo cells—translation and comment of janssen’s paper from 1895. *Granular Matter*, 8(2):59–65, 2006.
- [9] RL Brown. Minimum energy theorem for flow of dry granules through apertures. *Nature*, 191(4787):458, 1961.
- [10] Rodolfo Blanco-Rodríguez and Gabriel Pérez-Ángel. Stress distribution in two-dimensional silos. *Physical Review E*, 97(1):012903, 2018.

- [11] Adem Dogangun, Zeki Karaca, Ahmet Durmus, and Halil Sezen. Cause of damage and failures in silo structures. *Journal of performance of constructed facilities*, 23(2):65–71, 2009.
- [12] James Kakalios. Resource letter gp-1: Granular physics or nonlinear dynamics in a sandbox. *American journal of physics*, 73(1):8–22, 2005.
- [13] Don McGlinchey. *Bulk solids handling*. Wiley-Blackwell, 2008.
- [14] L Vanel and E Clément. Pressure screening and fluctuations at the bottom of a granular column. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 11(3):525–533, 1999.
- [15] L Vanel, P Claudin, J Bouchaud, ME Cates, E Clement, and JP Wittmer. Stresses in silos: comparison between theoretical models and new experiments. *Physical Review Letters*, 84(7):1439–42, 2000.
- [16] James W Landry, Gary S Grest, and Steven J Plimpton. Discrete element simulations of stress distributions in silos: crossover from two to three dimensions. *Powder technology*, 139(3):233–239, 2004.
- [17] Yann Bertho, Frédérique Giorgiutti-Dauphiné, and Jean-Pierre Hulin. Dynamical janssen effect on granular packing with moving walls. *Physical review letters*, 90(14):144301, 2003.
- [18] Francisco Vivanco, José Mercado, Francisco Santibáñez, and Francisco Melo. Stress profile in a two-dimensional silo: Effects induced by friction mobilization. *Physical Review E*, 94(2):022906, 2016.
- [19] J Horabik and R Rusinek. Pressure ratio of cereal grains determined in a uniaxial compression test. *International Agrophysics*, 16(1):23–28, 2002.
- [20] Renzo Di Felice and Carla Scapinello. On the interaction between a fixed bed of solid material and the confining column wall: The Janssen approach. *Granular Matter*, 12(1):49–55, 2010.
- [21] Mohamed Hassan Khalili, Jean-Noël Roux, Jean-Michel Pereira, Sébastien Brisard, and Michel Bornert. Numerical study of one-dimensional compression of granular materials. i. stress-strain behavior, microstructure, and irreversibility. *Physical Review E*, 95:032907, Mar 2017.
- [22] Junhwan Lee, Tae Sup Yun, Dongyeol Lee, and Junghwoon Lee. Assessment of k_0 correlation to strength for granular materials. *Soils and Foundations*, 53(4):584–595, 2013.

- [23] Joanna Wiącek and Marek Molenda. Effect of particle size distribution on micro-and macromechanical response of granular packings under compression. *International Journal of Solids and Structures*, 51(25):4189–4195, 2014.
- [24] JC Lopera Perez, CY Kwok, C O’Sullivan, X Huang, and K Hanley. Numerical study of one-dimensional compression in granular materials. *Géotechnique Letters*, 5(3):96–103, 2015.
- [25] Xiaoqiang Gu, Jing Hu, and Maosong Huang. k_0 of granular soils: a particulate approach. *Granular Matter*, 17(6):703–715, 2015.
- [26] R. M. Nedderman. *Statics and Kinematics of Granular Materials*. Cambridge University Press, 1992.
- [27] Chris J Brown and Jørgen Nielsen. *Silos: fundamentals of theory, behaviour and design*. CRC Press, 1998.
- [28] JW Carson. Understanding and eliminating particle segregation problems. *Bulk Solids Handling*, 6:139–144, 1986.
- [29] Julio M Ottino and DV Khakhar. Fundamental research in heaping, mixing, and segregation of granular materials: challenges and perspectives. *Powder technology*, 121(2-3):117–122, 2001.
- [30] Olivier Pouliquen. Scaling laws in granular flows down rough inclined planes. *Physics of fluids*, 11(3):542–548, 1999.
- [31] Wim A Beverloo, Hendrik Antonie Leniger, and J Van de Velde. The flow of granular solids through orifices. *Chemical engineering science*, 15(3-4):260–269, 1961.
- [32] C Mankoc, A Janda, Roberto Arevalo, JM Pastor, Iker Zuriguel, A Garcimartín, and Diego Maza. The flow rate of granular materials through an orifice. *Granular Matter*, 9(6):407–414, 2007.
- [33] Sara María Rubio-Largo, A Janda, D Maza, I Zuriguel, and RC Hidalgo. Disentangling the free-fall arch paradox in silo discharge. *Physical review letters*, 114(23):238002, 2015.
- [34] Mike P Allen and Dominic J Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford university press, 1989.
- [35] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic press, 1996.

- [36] Thorsten Pöschel and Thomas Schwager. *Computational granular dynamics: models and algorithms*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [37] J Schäfer, S Dippel, and DE Wolf. Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de physique I*, 6(1):5–20, 1996.
- [38] Peter A Cundall and Otto DL Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1):47–65, 1979.
- [39] L Brendel and S Dippel. Lasting contacts in molecular dynamics simulations. In *Physics of Dry Granular Media*, volume 350 of *NATO ASI Series*, pages 313–318. Springer, 1998.
- [40] Mao Ye. Multi-level modeling of dense gas-solid two-phase flows. 2005.
- [41] Stefan Luding. Cohesive, frictional powders: contact models for tension. *Granular matter*, 10(4):235, 2008.
- [42] Gabriel Pérez. Numerical simulations in granular matter: The discharge of a 2d silo. *Pramana*, 70(6):989–1007, 2008.
- [43] BJ Glasser and I Goldhirsch. Scale dependence, correlations, and fluctuations of stresses in rapid granular flows. *Physics of Fluids*, 13(2):407–420, 2001.
- [44] Isaac Goldhirsch. Stress, stress asymmetry and couple stress: from discrete particles to continuous fields. *Granular Matter*, 12(3):239–252, 2010.
- [45] Riccardo Artoni and Patrick Richard. Average balance equations, scale dependence, and energy cascade for granular materials. *Physical Review E*, 91(3):032202, 2015.
- [46] Alexander Stukowski. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1):015012, 2009.
- [47] Alexander Stukowski. OVITO—the open visualization tool. <http://ovito.org/>.
- [48] Maya Muthuswamy and Antoinette Tordesillas. How do interparticle contact friction, packing density and degree of polydispersity affect force propagation in particulate assemblies? *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2006(09):P09003, 2006.

- [49] Daniel M Mueth, Heinrich M Jaeger, and Sidney R Nagel. Force distribution in a granular medium. *Physical Review E*, 57(3):3164, 1998.
- [50] Farhang Radjai. Modeling force transmission in granular materials. *Comptes Rendus Physique*, 16(1):3–9, 2015.
- [51] Thomas Weinhart, Carlos Labra, Stefan Luding, and Jin Y Ooi. Influence of coarse-graining parameters on the analysis of dem simulations of silo flow. *Powder technology*, 293:138–148, 2016.
- [52] Alvaro Janda, Iker Zuriguel, and Diego Maza. Flow rate of particles through apertures obtained from self-similar density and velocity profiles. *Physical review letters*, 108(24):248001, 2012.
- [53] Diego Gella, Diego Maza, and Iker Zuriguel. Role of particle size in the kinematic properties of silo flow. *Physical Review E*, 95(5):052904, 2017.