

Dinámica molecular de medios granulares.

Roberto Arévalo Turnes
Departamento de Física y Matemática Aplicada
Universidad de Navarra

Mayo, 2007

Agradecimientos

En primer lugar, quisiera dar las gracias a mi director de tesis Diego Maza por acogerme con entusiasmo e ilusión. Iniciar una línea numérica en un grupo experimental no es fácil, pero con su ayuda, confianza y apoyo estos tres años han resultado productivos e interesantes. He de añadir que no lo habrían sido tanto de no ser por Ángel Garcimartín, Iker Zuriguel, José Martín Pastor, Cristian Mancok y Álvaro Janda cuya amistad y ayuda han enriquecido mi vida y mi trabajo.

A todos los doctorandos: Montserrat Miranda, María Yoldi, Alberto de la Torre, Maximiliano Giuliani, Iván Efrain Martínez, Joaquín Goñi y Gerard Vidal les agradezco su compañerismo dentro y fuera de la universidad. Y a ellos y al resto de miembros del departamento: Sergio Ardanza-Trevijano, Jean Bragard, Javier Burguete, María Jesús Chasco, Jorge Elorza, Ángel Garcimartín, Wenceslao González, Héctor L. Mancini, Diego Maza, Carmen Palacios, Antonio Peláez, Iker Zuriguel, Pilar Ayúcar y Pedro Elizalde les agradezco su acogida, la ayuda en los pequeños problemas de cada día y el ser capaces de hacer del departamento un lugar agradable al que venir a trabajar todos los días.

Deseo agradecer a todos los miembros del Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (La Plata, Argentina) dirigido por el Dr. Raúl Grigera su amable acogida durante el mes de noviembre de 2005. Fernando Vericat, Luis Pugnali, Lucas Valluzzi y Marcos Valluzzi con quienes trabajé estu-
pendamente hicieron, además, mi estancia en la ciudad muy agradable.

Parte de los resultados de este trabajo se obtuvieron haciendo uso del cluster de cálculo del departamento que instalaron Jean Bragard y Joaquín Goñi.

Deseo expresar mi agradecimiento a la Asociación de Amigos de la Universidad por las tres becas que me han concedido durante los cursos 2004 – 2005, 2005 – 2006 y 2006 – 2007.

A mis padres y hermano les agradezco sus continuas ofertas de ayuda y sus muestras de confianza, apoyo e ilusión en mi trabajo.

Índice general

1. Introducción.	4
1.1. Medios granulares.	4
1.2. Métodos numéricos.	5
1.2.1. Dinámica Molecular de partículas blandas.	5
1.2.2. Dinámica Molecular de partículas duras.	6
1.2.3. Dinámica de contactos.	7
1.2.4. Método de Monte Carlo.	8
1.2.5. Autómatas celulares.	9
2. Dinámica molecular de partículas blandas.	12
2.1. Introducción.	12
2.2. Fuerzas de interacción.	12
2.2.1. Fuerza normal.	12
2.2.2. Fuerza tangencial.	14
2.3. Integración de las ecuaciones de movimiento.	15
2.4. Implementación eficiente.	17
2.4.1. Listas de vecinos.	18
2.4.2. División del espacio en celdas.	19
2.5. Comentarios finales.	20
3. Descarga de silos por gravedad I: inicio de la descarga.	22
3.1. Introducción.	22
3.2. Perfiles de velocidad y densidades de probabilidad.	23
3.3. Mecánica estadística del silo.	27
3.4. Comportamiento a tiempos largos.	29

4. Descarga de silos por gravedad II: flujo de salida.	32
4.1. Introducción.	32
4.2. Flujo en función del orificio de salida.	33
4.2.1. Flujo resuelto en el tiempo.	33
4.3. Densidad en la región fluidizada.	36
5. Conclusiones y perspectivas.	41
Bibliografía	43

Capítulo 1

Introducción.

El presente trabajo se estructura en cinco capítulos. El primero está dedicado a introducir los medios granulares, que son el objeto de nuestro estudio, así como una perspectiva de los métodos numéricos más empleados en la literatura. El segundo capítulo presenta los detalles del método numérico empleado en este trabajo. En los capítulos 3.º y 4.º se describen los resultados obtenidos. Por último, el capítulo 5.º resume el trabajo realizado y las líneas que podrían seguirse en el futuro.

1.1. Medios granulares.

Un medio granular [1] está compuesto por partículas macroscópicas que interactúan mutuamente por medio de fuerzas de contacto. El tamaño de los granos varía desde las décimas de milímetro de los polvos hasta los centímetros o metros en las aplicaciones industriales o estudios geológicos. La característica fundamental de los denominados medios granulares secos, a los que está dedicado este trabajo, es que las fuerzas de interacción son de contacto y disipativas. Los mecanismos de disipación de energía incluyen la deformación o rotura de pequeñas irregularidades en la superficie de los granos, la deformación permanente de las partículas y la propagación de fonones en el material. En los medios granulares húmedos se toman en cuenta, además, fuerzas adhesivas como la de Van der Waals.

Los medios granulares presentan gran variedad de comportamientos en función de las fuerzas que se les apliquen. Así, en un reloj de arena podemos ver el material fluir del depósito superior al inferior de una forma que nos recuerda mucho a cómo fluye un líquido. La arena se deposita en la parte inferior del reloj formando una pila cónica que mantiene un ángulo aproximadamente constante, de manera que lo que nos parecía un fluido se comporta ahora como un sólido. En ausencia de gravedad o en las capas

superiores de un depósito agitado verticalmente, los granos se comportan de forma similar a las partículas de un gas de moléculas, con la salvedad de que las colisiones son disipativas.

1.2. Métodos numéricos.

Debido a que se trata de un problema de muchos cuerpos y a la dificultad de tratar las fuerzas disipativas, se ha hecho uso desde temprano de técnicas numéricas para integrar las ecuaciones de movimiento de los constituyentes individuales del medio. A partir del conocimiento de todas las trayectorias y fuerzas se pueden obtener las cantidades de interés como, por ejemplo, campos de velocidades en diversas geometrías, flujos de materia o distribuciones de presión en contenedores.

A diferencia de lo que ocurre en líquidos y gases clásicos, en medios granulares carecemos de un método numérico óptimo para integrar las ecuaciones de movimiento, a causa del carácter disipativo de la interacción. No obstante, las técnicas clásicas se han adaptado con éxito y se han desarrollado algunas nuevas para tratar la disipación. Entre todas ellas las más utilizadas son:

- Dinámica Molecular de partículas blandas.
- Dinámica Molecular de partículas duras (o *event-driven*).
- Dinámica de contactos.
- Método de Monte Carlo.
- Autómatas celulares.

A continuación damos una breve descripción de cada una de estas técnicas.

1.2.1. Dinámica Molecular de partículas blandas.

Este método se desarrolló originalmente para calcular la interacción entre moléculas de un gas o un líquido en aproximación newtoniana [2]. Las ecuaciones a integrar son las de Newton con la fuerza dada por un potencial de interacción que consta de dos partes. Una ligeramente atractiva a distancias mayores que el tamaño de un átomo o molécula, y otra fuertemente repulsiva a distancias menores, cuando las nubes electrónicas se solapan levemente. Este método se aplica a los medios granulares truncando el potencial de interacción, que conserva su parte repulsiva a distancias que ahora se interpretan como inferiores al diámetro del grano, mientras que es nulo a

distancias superiores. La interacción es, por tanto, de contacto y consistente en un ligero solapamiento de los granos en colisión.

Los detalles de la fuerza que experimentan las partículas dependen del modelo que uno escoja [3]. Sin embargo, todos comparten algunas características necesarias para modelar un medio granular:

- La fuerza repulsiva es proporcional al solapamiento de los granos.
- La fuerza disipativa es de carácter viscoso, proporcional a la velocidad de impacto relativa.
- Hay una fuerza perpendicular a la dirección de la colisión dada por el criterio de Coulomb¹.

Una vez conocidos los detalles de la fuerza, el método de dinámica molecular procede a la integración de las ecuaciones de Newton, para lo que será necesario conocer las posiciones y velocidades iniciales de todas las partículas. La integración numérica puede, en principio, efectuarse por cualquier método: desde Euler a Runge-Kutta o métodos tipo predictor-corrector. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que no todos los métodos son igualmente óptimos a la hora de resolver un determinado problema.

Como este es el método por el que obtenemos los resultados presentados en este trabajo, los esquemas de interacción, de integración, así como su implementación serán discutidos detalladamente más adelante.

1.2.2. Dinámica Molecular de partículas duras.

A pesar del nombre, este método se diferencia radicalmente del anterior [2, 4]. En primer lugar, las partículas no se solapan en absoluto, de ahí que se las considere duras. En segundo lugar, no hay fuerzas: cuando dos granos chocan intercambian sus velocidades de acuerdo con una regla de colisión predefinida.

El punto de partida consta, como antes, de partículas con posiciones y velocidades conocidas, todas ellas separadas de manera que no haya dos en interacción. Las ecuaciones de Newton las obligan a seguir trayectorias balísticas perfectamente determinadas, pudiéndose calcular qué dos partículas serán las primeras en colisionar y en qué instante de tiempo. Los constituyentes del medio avanzan sus posiciones hasta dicho instante, se detienen y tiene lugar la colisión entre los dos granos implicados. La colisión consiste en la actualización de las velocidades según una regla que tiene en cuenta la

¹El criterio de Coulomb establece que en un contacto no hay deslizamiento a menos que la fuerza tangencial sea mayor que un cierto límite, dado por el coeficiente de fricción estático multiplicado por la fuerza normal.

conservación del momento lineal y que la energía cinética final difiere de la inicial de una manera que se supone conocida y medida por el coeficiente de restitución. Una vez actualizadas las dos velocidades implicadas en el choque, puede volverse a calcular el instante en que tendrá lugar la siguiente colisión. Todos los granos se mueven balísticamente hasta ese momento, en que las velocidades de los granos implicados en el choque son actualizadas de acuerdo con la regla de colisión. El proceso de cálculo de las trayectorias continúa así dirigido por eventos (colisiones).

El caso más sencillo de regla de colisión sería el siguiente:

$$v_1' = v_1 - \frac{1 + \epsilon}{2} v_n \quad (1.1)$$

$$v_2' = v_2 + \frac{1 + \epsilon}{2} v_n \quad (1.2)$$

donde las velocidades v_i' son las posteriores a la colisión y las v_i las anteriores, v_n es la velocidad relativa de las partículas en la dirección de la colisión y ϵ es el coeficiente de restitución. La pérdida de energía cinética en la colisión está dada por

$$\Delta E = -\frac{m_{12}}{2} (1 - \epsilon^2) v_n^2 \quad (1.3)$$

siendo m_{12} la masa reducida de los granos. El caso más realista de regla de colisión usa un coeficiente de restitución dependiente de la velocidad relativa, aunque en muchas aplicaciones se toma constante. Cuando se toma en cuenta la rotación de las partículas, se necesita una regla de colisión en la dirección perpendicular a la de choque. Esta regla implica a las velocidades de rotación de los granos y un coeficiente de restitución propio.

1.2.3. Dinámica de contactos.

Este método de integración del movimiento surgió para ser específicamente aplicado al tratamiento de fuerzas de contacto [5], por lo que ha sido muy utilizado en los medios granulares [6]. La dinámica de contactos calcula las fuerzas como las resultantes de dos restricciones que se deben cumplir en todo contacto. En primer lugar, los granos son rígidos e indeformables, no hay ningún solapamiento. La segunda restricción es el criterio de Coulomb: en un contacto no hay deslizamiento a menos que la fuerza tangencial sea mayor que un cierto límite, dado por el coeficiente de fricción estático multiplicado por la fuerza normal. Una vez conocidas las fuerzas, las nuevas posiciones y velocidades se determinan integrando la ecuación de movimiento de Newton.

Consideremos el movimiento de dos granos. Ellos avanzan según las fuerzas que tengan aplicadas (como la gravitatoria o las que resulten de una colisión anterior) hasta que la distancia que separa sus superficies se hace

nula o negativa. En ese momento, el tiempo deja de avanzar y se procede a calcular las fuerzas de manera que la distancia entre sus superficies y la velocidad relativa entre ellas sean ambas nulas. Las configuraciones de fuerzas que verifican estas condiciones pueden ser múltiples, se tomarán las fuerzas mínimas. Ahora se comprobará si todas las fuerzas verifican el criterio de Coulomb. De no ser así, querrá decir que el contacto es deslizante y habrá que recalcular las fuerzas tangenciales eliminando la restricción de que la velocidad relativa entre las superficies de contacto sea nula.

En una situación normal no tendremos dos granos, sino muchos y, por tanto, múltiples contactos. Los tres pasos anteriores no se aplican una sola vez en cada paso de integración, sino varias veces de forma iterativa hasta que todos los contactos verifican las restricciones en las fuerzas. Una vez logrado esto, la integración avanza al siguiente instante de tiempo haciendo uso de las fuerzas recién obtenidas para calcular la aceleración y de ella las nuevas velocidades y posiciones. En el nuevo paso de integración, las fuerzas no se obtienen de las anteriores, en cambio son todas puestas a cero y vueltas a calcular iterativamente sobre las imposiciones de la rigidez de los granos y el criterio de Coulomb. Este proceso iterativo es global, implica a las fuerzas sobre cada contacto a la vez, lo que supone una diferencia importante con los métodos anteriores en los que el contacto se resuelve localmente.

La dinámica que surge de este método de integración no es suave, a diferencia de lo que ocurre en las *dinámicas moleculares*, sino que debido a cómo se calculan las fuerzas, la velocidad puede evolucionar a pequeños saltos. Debido a esta característica, no merece la pena usar esquemas de integración de orden grande y se suele optar por un simple método de Euler que alivia el esfuerzo computacional que supone el cálculo iterativo de las fuerzas.

1.2.4. Método de Monte Carlo.

Este método fue introducido para calcular las propiedades de un gas de partículas de baja densidad que obedece a la ecuación de Boltzmann [7, 8]. La celda de integración se divide en subceldas de tamaño L tal que

$$2d < L < l_{clm} \quad (1.4)$$

siendo d el diámetro de las partículas y l_{clm} el camino libre medio. La integración tiene lugar en pasos de tamaño τ lo bastante pequeño como para que la partícula más rápida necesite varios pasos para cambiar de celda. En cada paso de integración tienen lugar dos procesos. En el primero, todas las partículas se desplazan sin sufrir ninguna colisión. Las nuevas posiciones y velocidades se obtienen de las actuales con un método numérico estándar. Es durante esta fase cuando se tiene en cuenta el efecto de las fuerzas externas, como la gravedad. En el segundo proceso tienen lugar las colisiones.

En cada subcelda se eligen de forma aleatoria M_c pares de partículas

$$M_c = \frac{N_c(N_c - 1) \sigma v_{max} \tau}{2V_c} \quad (1.5)$$

donde N_c es el número de partículas en la subcelda, v_{max} es un límite superior para la velocidad relativa de las partículas colisionantes, σ es la sección transversal de choque o sección eficaz ($4R$ para esferas en dos dimensiones y $4\pi R^2$ en tres). En [8] Müller *et al.* igualan v_{max} al doble de la velocidad de la partícula más rápida. El número de colisiones debe ser proporcional a la velocidad relativa, para ello en Müller *et al.* adoptan el siguiente método: para un par de partículas i y j la colisión tiene lugar si

$$\frac{|\vec{v}_i - \vec{v}_j|}{v_{max}} < Z \quad (1.6)$$

donde Z es una variable aleatoria uniformemente distribuida en $[0, 1]$. Finalmente, debido a que la colisión tiene lugar independientemente de la posición de las partículas en la subcelda, se necesita un parámetro de impacto b . Asumiendo la hipótesis de caos molecular, se da a b un valor aleatorio tomado de $[-2R, 2R]$ en dos dimensiones y del círculo de radio $2R$ en tres. Las velocidades que resultan de la colisión se obtienen de las incidentes igual que en el método de dinámica molecular de partículas rígidas. Así, al introducir un coeficiente de restitución ϵ hacemos que el medio sea disipativo.

1.2.5. Autómatas celulares.

Los modelos de red se formularon para resolver problemas de flúidos, sin embargo pueden adaptarse para tener en cuenta la disipación [9]. Consideremos una red triangular a cada uno de cuyos nodos asociamos siete variables binarias v_i ($i = 0, 1 \dots 6$). Cada v_i ($i = 1 \dots 6$) es un vector a uno de los nodos vecinos, mientras que v_0 es el vector nulo. Podemos pensar en estos vectores como velocidades que llevarán a las partículas a los lugares apuntados, siendo v_0 el estado de reposo. En un instante dado cada una de las variables asociadas a un nodo puede estar ocupada o vacía. En el primer caso, en ese lugar habrá una partícula con la velocidad indicada por la variable. El número máximo de partículas por nodo es siete y el mínimo ninguna. El tiempo avanza en saltos discretos $t = 0, 1, 2, \dots$ en cada uno de los cuales tienen lugar dos procesos: colisión y propagación. En el primero, las partículas alteran sus velocidades debido a las colisiones según unas reglas. En la propagación, las partículas se mueven a los lugares indicados por sus velocidades. La figura FIG 1.1 resume las reglas de colisión. A la izquierda aparece la velocidad de las partículas que están en un nodo dado, y a la derecha la situación final resultante. Si esta última puede ser una de dos equiprobables (debido a la simetría de la red) se elige una con probabilidad 0,5. El parámetro p es un número real comprendido entre 0 y 1.

Tomando $p = 0$ las reglas de colisión conservan la energía y la cantidad de movimiento, mientras que $p \neq 0$ da lugar a un proceso disipativo. Las dos últimas líneas representan la colisión de dos partículas con una tercera en reposo. Como en cada nodo sólo puede haber una partícula en reposo, inmediatamente después del proceso de colisión las dos partículas incidentes saltan aleatoriamente a uno de los nodos vecinos para ocupar la posición de reposo.

La gravedad se incorpora haciendo que cada partícula en reposo tenga una probabilidad $g/2$ (con g entre 0 y 1) de ser desplazada al nodo abajo a su izquierda/derecha con el vector velocidad apuntando en la dirección del desplazamiento. La variable a la que resulte desplazada la partícula debe estar desocupada. Las partículas en movimiento sufrirán un cambio de una unidad en su vector velocidad en la dirección apuntada por la gravedad.

Por último, las paredes se introducen haciendo que el vector velocidad se refleje cuando la partícula llega al nodo que hace de frontera. Esto da lugar a paredes lisas. Si introducimos una probabilidad $b \neq 0$ de que la pared envíe a la partícula en dirección incidente (y $1 - b$ de que la refleje) tendremos paredes rugosas.

En el siguiente capítulo exponemos los modelos de contacto y métodos de integración que se usan en dinámica molecular de partículas blandas.

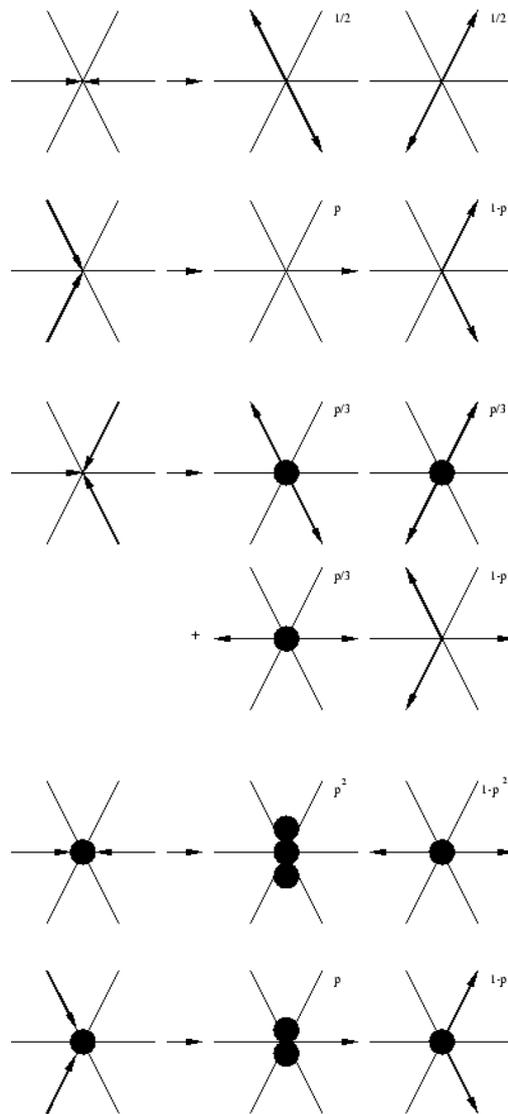


Figura 1.1: Reglas de colisión para un modelo de red. Fuente: <http://www.hlr.de/people/mueller/papers/honnef99/node3.html>.

Capítulo 2

Dinámica molecular de partículas blandas.

2.1. Introducción.

En este capítulo analizaremos en detalle los elementos de que consta un algoritmo de dinámica molecular de partículas blandas (DM en adelante): expresión explícita de las fuerzas tanto en la dirección de la colisión como en la perpendicular [3] y método de integración de las ecuaciones de movimiento. La última sección estará dedicada a la implementación eficiente [2, 10] de estos ingredientes. Nos restringiremos al caso bidimensional en el que tenemos dos grados de libertad traslacionales y uno de rotación.

2.2. Fuerzas de interacción.

2.2.1. Fuerza normal.

La fuerza que actúa sobre cada grano en la dirección que une sus centros puede considerarse dividida en dos contribuciones. Un término repulsivo que impide a los granos atravesarse mutuamente y que es proporcional al solapamiento de los mismos. Y un término disipativo proporcional a la velocidad relativa de las partículas en la dirección del choque. En el caso más sencillo podemos escribir

$$F_n = k_n \xi - \gamma_n \dot{\xi} \quad (2.1)$$

donde k_n y γ_n son coeficientes de proporcionalidad. El solapamiento viene dado para discos o esferas de radios R_1 y R_2 por $\xi = R_1 + R_2 - r_{ij}$, siendo r_{ij} la distancia entre los centros. Este modelo puede visualizarse como un muelle amortiguado en el punto de contacto, con k_n y γ_n como constantes de rigidez y amortiguamiento respectivamente. Con esta interpretación

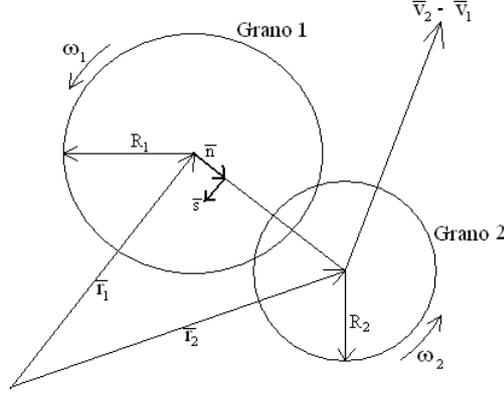


Figura 2.1: Esquema de la colisión de dos granos.

podemos calcular el tiempo de contacto (medio periodo de oscilación)

$$t_c = \pi \left(\frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2m_{eff}} \right)^2 \right)^{-1/2} \quad (2.2)$$

y el coeficiente de restitución

$$\epsilon = -v_n^f / v_n^i = \exp \left(\frac{-\gamma_n}{2m_{eff}} t_c \right) \quad (2.3)$$

donde m_{eff} es la masa efectiva o reducida de los granos en colisión y v_n^f y v_n^i las velocidades relativas en la dirección normal posterior y anterior al choque respectivamente. El coeficiente de restitución mide la energía que se pierde durante el choque, por eso viene dado por la duración del mismo, así como por el coeficiente γ_n que determina la energía disipada por el muelle amortiguado durante su movimiento.

La teoría de Hertz del contacto elástico da lugar a un término repulsivo no lineal al que se añade una contribución disipativa como la anterior para tener

$$F_n = k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \dot{\xi}. \quad (2.4)$$

En este caso el coeficiente de restitución no es constante, sino que depende de la velocidad de impacto, así como el tiempo de colisión [3]

$$t_c = 3,21 \left(\frac{m_{eff}}{k_n} \right)^{2/5} v_n^i^{-1/5}. \quad (2.5)$$

Estos dos modelos de fuerza normal son los más ampliamente usados en la literatura de DM para medios granulares.

2.2.2. Fuerza tangencial.

Esta fuerza está dada por la ley de Coulomb de la fricción, que nos dice que no hay deslizamiento de un cuerpo sobre otro a menos que la fuerza perpendicular a la línea de contacto sea superior a cierto umbral. Este umbral es la fuerza normal por el coeficiente de fricción estática. Si se supera este valor crítico, se produce deslizamiento y la fuerza tangencial pasa a ser la normal por el coeficiente de fricción dinámico. Podemos por lo tanto escribir, para la fricción dinámica [3],

$$F_t = -\mu|F_n|sign(v_t) \quad (2.6)$$

donde v_t es la velocidad relativa de las superficies en contacto

$$v_t = (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \vec{s} + \omega_1 R_1 + \omega_2 R_2 \quad (2.7)$$

siendo ω_1 y ω_2 las velocidades de rotación de los granos respecto de sus centros y \vec{s} un vector unitario perpendicular a la dirección que une sus centros. Esta implementación tiene el inconveniente de que F_t salta entre valores positivos y negativos cerca de $v_t = 0$, siendo discontinua en este punto. Aunque el valor medio de F_t será correcto, no es conveniente desde el punto de vista de la integración numérica el tener estos saltos discontinuos de signo.

Una forma muy utilizada de evitar el anterior inconveniente es escribir [3]

$$F_t = -\gamma_t v_t \quad (2.8)$$

donde γ_t es una constante sin interpretación física. Ahora la fuerza se comporta suavemente, sin saltos. Sin embargo se presentan dos problemas. El primero es que se obtiene un coeficiente de restitución tangencial constante que impide alcanzar $v_t = 0$ (rodadura). El segundo es que al no depender Ec(2.8) de la fuerza normal, no se obtienen resultados “físicos” para impactos casi totalmente normales u oblicuos.

La solución más extendida a los anteriores problemas consiste en unir Ec(2.6) y Ec(2.8) en una sola expresión [3]

$$F_t = -\min(\mu|F_n|, \gamma_t|v_t|) sign(v_t) \quad (2.9)$$

donde γ_t sigue siendo un parámetro sin interpretación física. Dándole un valor relativamente alto a este parámetro, la mayor parte del tiempo estaremos tomando el valor correcto para la fuerza tangencial $\mu|F_n|$. A medida que las velocidades se van haciendo pequeñas, debido a la disipación, y nos acercamos al régimen en que este término da problemas, la función *min* hará que tomemos $\gamma_t|v_t|$ obteniendo un comportamiento regular.

Las expresiones de la fuerza tangencial presentadas hasta ahora proporcionan una fuerza de fricción dinámica, no estática. En efecto, si un cuerpo desliza sobre otro con una fricción dada por Ec(2.8) o Ec(2.9), esta se hará nula en el momento en que consiga frenar el deslizamiento, con lo que este podría volver a iniciarse. Tendríamos un comportamiento “a saltos” que, aunque pequeños, nunca sería estático. Una fuerza de fricción más realista debería poder tener un valor no nulo en situaciones estáticas para poder mantener la situación de no deslizamiento una vez alcanzada.

Podemos implementar una fuerza de fricción estática sustituyendo Ec(2.9) por [11]

$$F_t = -\min(\mu|F_n|, |F_s|) \operatorname{sign}(\zeta) \quad (2.10)$$

donde

$$F_s = k_t \zeta - \gamma_t v_t \quad (2.11)$$

$$\zeta(t) = \int_{t_o}^t v_t(t') dt'. \quad (2.12)$$

Ahora la fuerza tangencial Ec(2.11) contiene un término elástico proporcional al desplazamiento de deslizamiento ζ y un término disipativo proporcional a la velocidad relativa en la dirección tangencial v_t . El desplazamiento ζ se calcula integrando v_t desde el instante en que dos granos entran en contacto en t_o hasta que dicho contacto finaliza. De esta manera, cuando el deslizamiento cesa y v_t se anula, la fuerza tangencial retiene un valor distinto de cero debido a que ζ tiene un valor constante a partir de ese instante. Este modelo puede visualizarse como un muelle en la dirección tangencial que comienza a estirarse cuando dos partículas entran en contacto, y continúa haciéndolo mientras hay deslizamiento. Cuando los granos dejan de deslizar uno sobre otro, el muelle deja de estirarse pero mantiene la deformación alcanzada hasta ese momento. Por último, el muelle desaparece cuando el contacto finaliza.

2.3. Integración de las ecuaciones de movimiento.

Una vez que hemos elegido un modelo de contacto podemos calcular la aceleración de cada partícula y, de ella, la nueva velocidad y posición. Para llevar a cabo este cálculo disponemos de múltiples métodos de distinta complejidad y precisión. En principio, podemos usar tanto el método de Euler como el de Runge-Kutta [12] en función de nuestras necesidades de precisión y velocidad. Sin embargo, cuando tratamos con sistemas hamiltonianos, una familia de métodos destaca como particularmente apropiada: los denominados métodos simplécticos. Se dice que las ecuaciones de movimiento tienen estructura simpléctica si se verifica [13]

$$\dot{\Gamma} = \mathbf{J} \nabla_{\Gamma} \mathcal{H} \quad (2.13)$$

donde $\mathbf{\Gamma} = (p_i, q_i)$ es un punto del espacio de fases, \mathcal{H} el hamiltoniano del sistema y \mathbf{J} está definida por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

siendo $\mathbf{1}$ la matriz unidad con número de filas y columnas igual al de grados de libertad del sistema. La evolución temporal está dada por el operador de Liouville

$$\dot{\mathbf{\Gamma}} = \hat{L}\mathbf{\Gamma} \quad (2.15)$$

$$\hat{L} \equiv -\nabla_{\mathbf{\Gamma}}\mathcal{H} \cdot \mathbf{J}\nabla_{\mathbf{\Gamma}} \quad (2.16)$$

La razón para preferir un método simpléctico frente a uno ordinario estriba en que los sistemas hamiltonianos no son estables frente a perturbaciones no hamiltonianas, que es precisamente lo que hacemos si aproximamos el hamiltoniano mediante un integrador genérico. El resultado es que el hamiltoniano se vuelve disipativo, con un comportamiento a largo plazo completamente diferente del esperado. Las principales propiedades de los métodos simplécticos son:

- Conservan la estructura simpléctica del hamiltoniano
 - Verifican el teorema de Liouville.
 - Son más estables que los métodos ordinarios.
- Conservan la energía y el momento angular.
- Son reversibles en el tiempo.

Los integradores simplécticos más utilizados son los denominados Verlet, Leap-Frog y velocity-Verlet. Este último es el que hemos utilizado en el presente trabajo, la posición y la velocidad se actualizan según las expresiones

$$x(t + \delta t) = x(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 \quad (2.17)$$

$$v(t + \delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \delta t)]\delta t \quad (2.18)$$

que para implementarse pueden escribirse separando el segundo paso en uno intermedio

$$x(t + \delta t) = x(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 \quad (2.19)$$

$$v\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right) = v(t) + \frac{1}{2}a(t)\delta t \quad (2.20)$$

$$v(t + \delta t) = v\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right) + \frac{1}{2}a(t + \delta t)\delta t. \quad (2.21)$$

Así, antes de aplicar Ec(2.21) nuestro algoritmo calcularía las fuerzas con las posiciones y velocidades actuales. Puede comprobarse que este método de segundo orden conserva la energía de un sistema hamiltoniano mejor que un Runge-Kutta [2] de cuarto orden. Además, posee la patente ventaja de ser sencillo de implementar y, al efectuarse en tres etapas, es relativamente rápido.

Nuestro sistema de partículas disipativas no es, desde luego, hamiltoniano. Sin embargo, al no existir métodos optimizados para los sistemas disipativos, los esquemas simplécticos se usan ampliamente para integrar las ecuaciones de movimiento de un medio granular debido a sus buenas características intrínsecas de precisión y estabilidad.

Por último cabe mencionar los métodos predictor-corrector, de entre los cuales los más usados son los de Gear de cuarto y quinto orden [10]. Estos algoritmos constan de tres pasos

1. *Predictor.* A partir de las posiciones y sus derivadas hasta orden n en t se obtienen las mismas cantidades en $t + \delta t$ mediante expansiones de Taylor. Entre estas cantidades está la aceleración.
2. *Fuerzas.* Con las posiciones y velocidades predichas se calculan las fuerzas según el modelo de contacto y, de ellas, las aceleraciones. Estas serán diferentes de las calculadas en el primer paso, siendo su diferencia igual a, digamos, Δa .
3. *Corrector.* Las posiciones y sus derivadas sufren correcciones proporcionales a Δa . Los coeficientes de proporcionalidad están determinados para maximizar la estabilidad del método.

La principal ventaja del predictor-corrector reside en su elevada precisión. Sin embargo, es costoso en recursos a la hora de implementarlo, requiere muchos cálculos adicionales y, numéricamente, resulta inestable frente a pasos de integración relativamente grandes.

2.4. Implementación eficiente.

Realizar los cálculos descritos arriba para un gran número de partículas es una tarea muy costosa. Si además deseamos un cálculo preciso deberemos trabajar con pasos de integración pequeños, aumentando linealmente el número de ciclos que debe ejecutar el algoritmo de cálculo. La implementación directa de los métodos expuestos daría lugar a un algoritmo excesivamente lento. Optimizar dicha implementación es un trabajo ineludible [2].

La mayor parte del cálculo se concentra en la obtención de las fuerzas que, al ser de pares, supone una operación de orden $O(N^2)$ si se implementa de forma directa. Disminuir el número de operaciones en este apartado supone reducir drásticamente el tiempo de cálculo. Existen fundamentalmente dos métodos para llevar a cabo esta reducción: las listas de vecinos y la división del espacio en celdas.

2.4.1. Listas de vecinos.

La fuerza sobre una partícula es la resultante de la fuerza que sobre ella ejercen sus vecinas. El cálculo de esta resultante supone recorrer la lista de partículas, verificar, para cada una, si están en contacto (la distancia entre sus centros es menor que la suma de sus radios) y, de ser así, calcular la fuerza. Sin embargo, dado que el cálculo avanza con pasos de integración pequeños, el entorno de una partícula cambia muy despacio. Las partículas que están a su alrededor, en contacto o susceptibles de entrar en contacto con ella, son las mismas durante varios (o muchos) pasos de integración. Resulta razonable reducir la búsqueda de contactos a las partículas que están cerca en el espacio.

El cálculo por listas de vecinos procede así: antes de comenzar a integrar las ecuaciones de movimiento elaboramos una lista que contiene en cada entrada un par de partículas tales que su separación es menor que una distancia crítica r_c prefijada. Esta distancia debe ser mayor que el alcance de la fuerza σ . En el caso de fuerzas de contacto $\sigma = R_1 + R_2$ siendo R_i el radio de una partícula¹. En cada paso de integración se recorre la lista de vecinos actualizando las distancias de cada par. Cada cierto número de pasos N_A se reelabora la lista. La actualización de las distancias de los vecinos es una operación de orden $O(N)$ y aunque la elaboración de la lista es de orden $O(N^2)$, sólo se realiza cada N_A pasos. Para calcular la fuerza recorreremos la lista y hacemos los cálculos sólo para aquellas partículas que estén en contacto.

La elección de N_A puede ser crítica: si es muy pequeño no ganaremos apenas tiempo de cálculo, si lo tomamos demasiado grande, nos perderemos colisiones y realizaremos cálculos incorrectos. Una forma de automatizar el cálculo del valor óptimo en cada paso de integración es la siguiente: cuando reelaboramos la lista de vecinos calculamos los dos máximos desplazamientos de entre todas las partículas (los desplazamientos se almacenan en una lista de tamaño N), cuando la suma de ambos es mayor que r_c procedemos a reelaborar la lista de vecinos y empezamos de cero el cálculo de los dos

¹Este requisito restringe el uso de las listas de vecinos a potenciales de interacción con una distancia de corte, como el nuestro, o que puedan truncarse por ser de decaimiento rápido o corto alcance, como el de Van der Waals. Este método no puede usarse con potenciales de decaimiento lento como, por ejemplo, el de Coulomb.

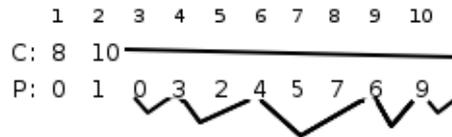


Figura 2.2: En este ejemplo la subcelda 2 contiene las partículas de índices 9, 6, 4, 3 y 0.

máximos desplazamientos.

2.4.2. División del espacio en celdas.

Este es un algoritmo totalmente de orden $O(N)$. Supongamos que nuestro cálculo se lleva a cabo en una celda de tamaño $L \times L$, dividámosla en $M \times M$ subceldas de tamaño

$$l = \frac{L}{M} > r_c \quad (2.22)$$

con r_c como se definió arriba. El número medio de partículas en cada celda es $N_m = N/M^2$. Los vecinos de una partícula dada sólo pueden estar en la misma subcelda o en una de las ocho adyacentes. Por tanto, inspeccionaremos, en media, $9NN_m$ partículas.

La implementación de este método tiene cierta complejidad. En primer lugar necesitamos una lista C con M^2 registros y una lista P con N registros. Cada registro de C contiene un número que señala un registro en P , este registro contiene un número que es el número de índice de una partícula que está en la subcelda cuyo número de índice es el dado por el número de registro de C . En la figura FIG 2.2 se muestra un ejemplo de cómo funciona esta implementación.

Antes de calcular las fuerzas hay que saber qué partículas están en cada subcelda:

```

for i = 1 to M * M
  C(i) = 0;
end for

for i = 1 to N
  indice_celda = [x(i) / l] + [y(i) / l] * M;
  P(i) = C(indice_celda);
  C(indice_celda) = i;
end for

```

Los corchetes indican que se toma la parte entera. El cálculo de todas las fuerzas supone recorrer todas las $M \times M$ subceldas y, para cada una, las subceldas vecinas

```

for m1 = 1 to M
  for m2 = 1 to M
    mi1 = m2 * M + m1    subcelda actual
    for mi2 Subceldas_Vecinas
      tomamos un grano de la
      subcelda actual y otro de la vecina
      for j1 = C(mi1)    los sucesivos se toman
                        como indique P(m1)
        for j2 = C(mi2)  los sucesivos se toman
                        como indique P(m2)
          si j1 y j2 son distintos se comprueba su distancia
          si j1 y j2 entran en contacto se calcula la fuerza
        end for
      end for
    end for
  end for
end for
end for

```

Las celdas vecinas se numeran desde cero, para buscar primero los vecinos en la propia subcelda de la partícula cuya fuerza resultante queremos obtener. El método resulta tanto más eficaz cuanto más pequeñas sean las subceldas, tamaño limitado por r_c . Aunque el método es de orden $O(N)$ involucra un número no pequeño de operaciones que lo hace óptimo sólo cuando tratamos, aproximadamente, con unas 4000 partículas o más; para 3000 partículas o menos, la lista de vecinos resulta más eficaz.

2.5. Comentarios finales.

La implementación de la fuerza de fricción estática requiere el uso de una lista de vecinos propia, de hecho, se trata de una lista de contactos a actualizar en cada paso de la integración, necesaria para poder integrar la velocidad tangencial en cada contacto. La necesidad de esta lista implica que, cuando usamos fricción estática, la división del espacio en celdas ya no es eficaz porque no se compagina fácilmente con la lista de contactos. En su lugar, es mejor implementar una lista de vecinos, aunque tratemos con más de 3000 partículas.

En el presente trabajo hemos tratado siempre con un medio confinado a una región del espacio. Para lograrlo disponemos unas paredes que pueden

estar constituidas por granos del mismo tipo y propiedades que aquellos que forman el medio granular, con los que interactúan. Las posiciones de estos granos no se actualizan durante el cálculo y constituyen así un medio de confinamiento. Otra posibilidad, también usada, consiste en hacer que cuando una partícula del medio llega a una frontera interactúe con una partícula de masa y radio infinitos. Esta estrategia tiene la ventaja de ahorrar número de partículas cuando la región a confinar es grande. En ambos casos los constituyentes de la frontera poseen constantes de rigidez, de amortiguamiento y coeficientes de fricción que pueden alterarse para cambiar las propiedades de la pared.

Capítulo 3

Descarga de silos por gravedad I: inicio de la descarga.

3.1. Introducción.

En este capítulo analizaremos los procesos que tienen lugar en el interior de un silo cuando el mismo comienza a descargarse. Estudiaremos dos casos: un silo con orificio de salida pequeño (comparable al tamaño de los granos) y otro con orificio de salida grande. Comprobaremos que el perfil de velocidades dentro del silo atraviesa un periodo transitorio antes de establecerse en un estado estacionario. Dicho transitorio se caracteriza por estadística no gaussiana y movimiento superdifusivo de los granos.

Clásicamente, el problema del movimiento en el interior de un silo que se descarga por gravedad a través de un orificio practicado en su base, ha sido tratado mediante dos aproximaciones bien distintas. Por un lado, se han propuesto modelos difusivos [14, 15] en los que huecos inyectados en el orificio de salida difunden hacia la parte superior del silo. Durante su movimiento los huecos intercambian posiciones con los granos que componen el medio (y que se suponen ordenados en una red) causando el desplazamiento de estos hacia la base. Por otra parte, se ha propuesto un modelo continuo [16] que, sin hacer hipótesis sobre el movimiento individual de los granos, puede predecir el perfil de velocidades en el silo. A pesar de su diferente fundamentación, ambos modelos dan los mismos resultados.

Recientes estudios experimentales [17] han puesto de manifiesto la necesidad de revisar estos modelos. Observando a tiempos cortos (inferiores al tiempo que tarda un grano en caer su diámetro) el movimiento de las partículas se encuentra que este es de tipo no gaussiano, caracterizado por dis-

tribuciones de probabilidad con colas anchas y el desplazamiento cuadrático medio es superdifusivo. Ninguna de estas características está contemplada en los modelos teóricos.

Un nuevo mecanismo propuesto [18] para explicar los experimentos se basa en considerar que los huecos que se inyectan por el orificio de salida no se mueven conservando su identidad. En su lugar, se disgregan en una “burbuja” que ocasiona el movimiento de un conjunto de granos (no el de uno solo). Así, estas burbujas se desplazan hacia la superficie del silo afectando a conjuntos de granos que efectúan movimientos hacia la base, estando estos pequeños movimientos colectivos correlacionados. Nuestros cálculos revelan que el inicio de la descarga es compatible con esta imagen de movimientos colectivos y estadística no gaussiana.

Los resultados presentados en este capítulo han sido obtenidos usando las ecuaciones

$$F_n = k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \dot{\xi} \quad (3.1)$$

$$F_t = -\min(\mu|F_n|, \gamma_t|v_t|) \text{sign}(v_t) \quad (3.2)$$

$$v_t = (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \vec{s} + \omega_1 R_1 + \omega_2 R_2 \quad (3.3)$$

correspondientes a un modelo de Hertz con fricción dinámica, con 5000 discos del mismo diámetro. La ecuación Ec(3.1) nos da la fuerza en la dirección que une los centros de los granos, la Ec(3.2) proporciona la fuerza en la dirección tangencial y Ec(3.3) es la velocidad relativa de las superficies en contacto. Los valores de los coeficientes en unidades reducidas son $k_n = 10^5 m g / d$, $\gamma_n = 100 m \sqrt{g/d}$, $\gamma_t = 300 m \sqrt{g/d}$, $\mu = 0,5$. El paso de integración es $1,25 \cdot 10^{-4} \tau$ con $\tau = \sqrt{d/g}$, siendo m , d y g la masa y diámetro de los discos y la aceleración de la gravedad, respectivamente. Las paredes del silo están construidas con el mismo tipo de granos que los que forman el medio y forman un contenedor de $50d$ de anchura por $100d$ de altura. El proceso seguido para obtener los resultados es el siguiente: los granos se colocan en una red regular y se les dan velocidades aleatorias tomadas de una distribución gaussiana. Se dejan caer bajo la acción de la gravedad a través de una tolva bajo la cuál está el silo rectangular en el que se almacenan. Una vez que todos los granos han sido depositados en el silo y que la energía cinética se ha reducido debido a la disipación, abrimos el orificio en la base del silo y comenzamos el proceso de medida. El tiempo de toma de datos es lo bastante corto como para que la altura del silo no cambie apreciablemente.

3.2. Perfiles de velocidad y densidades de probabilidad.

En esta sección analizamos la evolución del perfil de velocidad vertical en el interior del silo. Usamos dos tamaños para el orificio de salida, $3,8d$

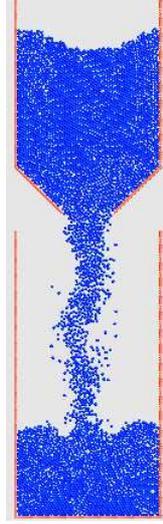


Figura 3.1: Imagen del proceso de llenado del silo mediante descarga a través de una tolva.

y $11d$ y calculamos el perfil de velocidad desde que se abre el orificio de salida hasta que el grano más alto cae dos veces su diámetro. Definimos este lapso de tiempo como el inicio de la descarga. Al ser un tiempo pequeño, estamos en condiciones de comparar nuestros resultados con los obtenidos en los experimentos.

Usando dos diferentes diámetros del orificio de salida, $3,8d$ y $11d$ estudiamos la evolución del perfil de velocidad vertical. Estos diámetros fueron escogidos porque pertenecen a dos regímenes bien distintos: para el primero, el flujo puede ser intermitente, mientras que esto no ocurre con el segundo. Calculamos el perfil de velocidad desde el momento en que se abre el orificio en la base del silo hasta que el perfil se hace estacionario. Para cada tamaño del orificio de salida realizamos 20 descargas independientes y promediamos los resultados.

En la FIG 3.2 mostramos la evolución promediada del perfil de velocidad, en la componente vertical, del orificio mayor. Es evidente que grupos de granos se mueven hacia abajo al principio de la descarga, mientras que estructuras que podemos describir como “burbujas” se desplazan hacia arriba. Estas burbujas son zonas en las que la velocidad media es mayor que en el resto del silo y su evolución refleja el régimen intermitente al inicio de la descarga. Cuando estas burbujas desaparecen, se desarrolla el perfil característico del flujo estacionario, que es gaussiano. Los resultados obtenidos con el orificio de salida más pequeño son similares pero aparece una diferencia importante: el tiempo necesario para alcanzar el flujo estable se incrementa. Esto se debe a que aparece un mayor número de burbujas en el

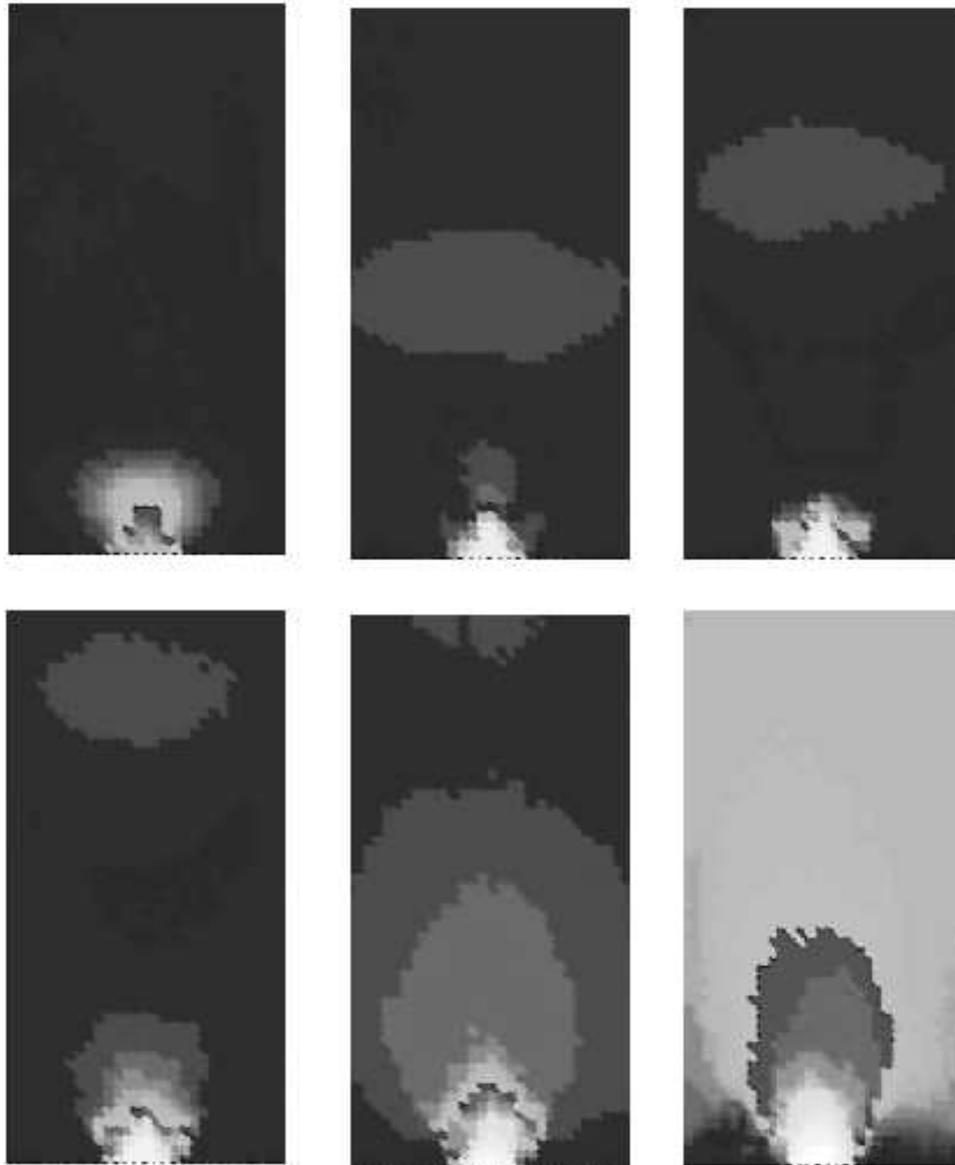


Figura 3.2: Evolución del perfil de velocidades vertical promedio para el orificio de tamaño $11d$. El tiempo aumenta de izquierda a derecha y de arriba a abajo. En pasos de simulación tras la apertura del orificio de salida cada imagen corresponde a 300, 700, 1100, 1700, 6300, 10000.

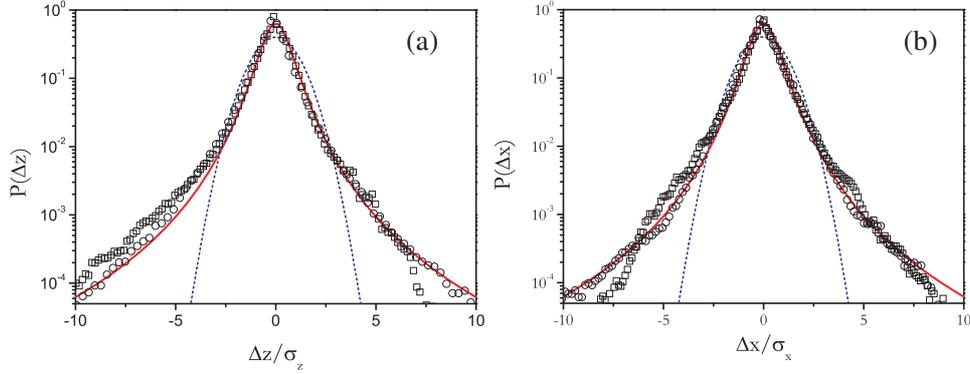


Figura 3.3: Funciones de distribución de los desplazamientos verticales (a) y horizontales (b). Los círculos son datos obtenidos con el silo de abertura $3,8d$ y los cuadrados con el de $11d$. La línea roja es la Ec(3.4) y la azul una gaussiana.

silos, induciendo un flujo intermitente.

Medimos los desplazamientos individuales de los granos durante la descarga en una ventana de tamaño $15d \times 15d$ centrada vertical y horizontalmente dentro del silo. Para poder comparar con los obtenidos experimentalmente, elegimos un tiempo de muestreo tal que el desplazamiento medio de las partículas es de $0,01d$ que es, aproximadamente, el mismo que en los experimentos. Para calcular los desplazamientos en la dirección vertical sustraemos el movimiento debido al flujo. En la FIG 3.3 mostramos las funciones de densidad de probabilidad normalizadas y en escala semilogarítmica. Los desplazamientos se presentan en una escala en la que su desviación estándar es la unidad, siendo los valores medidos del orden de $10^{-3}d$ tanto en la vertical como en la horizontal. Los resultados obtenidos apenas difieren en las direcciones vertical y horizontal y son claramente no gaussianos. Las diferencias aparecen tanto en la región central de las distribuciones como en las colas, que son anchas. Nuestras curvas están muy bien descritas por la expresión

$$P(\Delta y) = \frac{2/\pi}{\left(1 + (\Delta y)^2\right)^2} \quad (3.4)$$

Al haber normalizado el área de nuestras curvas y la escala de los desplazamientos según la desviación estándar, no se requieren parámetros de ajuste. Las curvas están dibujadas directamente encima de los datos. En los experimentos descritos en [17] se obtienen curvas similares con colas anchas pero no se propone ninguna descripción analítica.

En la FIG 3.4 representamos el desplazamiento cuadrático medio en cada dirección en ambos silos. La pendiente en escala logarítmica es mayor que

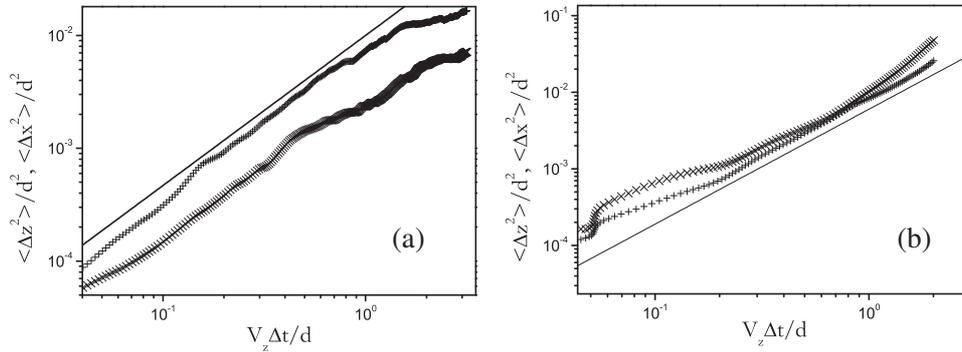


Figura 3.4: Desplazamientos cuadráticos medios en las componentes horizontal y vertical en escala logarítmica. El panel izquierdo muestra los resultados del silo de abertura $3,8d$ y la línea continua tiene pendiente $1,33$. El panel derecho muestra los resultados del silo con $11d$ de abertura y la línea recta tiene pendiente $1,5$. Los signos $+$ representan los datos de la componente horizontal y los x los de la vertical.

uno, de modo que el desplazamiento de los granos es superdifusivo. Los desplazamientos cuadráticos medios escalan según $\langle x^2 \rangle \propto t^{1,33}$ y $\langle z^2 \rangle \propto t^{1,37}$ para el silo con orificio de salida $3,8d$, $\langle x^2 \rangle \propto t^{1,5}$ y $\langle z^2 \rangle \propto t^{1,51}$ para el silo con orificio de salida $11d$. Estos resultados son consistentes con los encontrados experimentalmente a tiempos cortos.

3.3. Mecánica estadística del silo.

El comportamiento de los granos arriba descrito puede entenderse haciendo uso de la hipótesis de las burbujas. Seguiremos las ideas y los cálculos desarrollados en [19], donde se estudia el comportamiento de una partícula browniana de masa variable. Supondremos, en efecto, que una burbuja es una partícula cuya masa fluctúa en un tiempo característico τ y que los posibles valores instantáneos de la masa están dados por una función de distribución $g(m)$. Esta imagen es razonable porque a medida que una burbuja evoluciona y se desplaza dentro del silo no está afectando al mismo número de granos en todo momento.

En un instante dado la masa de la burbuja será m_b y su distribución de velocidades convergerá a

$$f(u) = \sqrt{\frac{\beta m_b}{2\pi}} e^{-\frac{m_b u^2}{2}} \quad (3.5)$$

La relajación a ese valor tendrá lugar en una escala de tiempo característica t_R que depende de la masa de la partícula y las propiedades del medio. Si

se verifica que $t_R \ll \tau$ entonces la distribución asintótica estará dada por

$$f(u) = \int dm g(m) \sqrt{\frac{\beta m_b}{2\pi}} e^{-\frac{m_b u^2}{2}} \quad (3.6)$$

Para seguir necesitamos una función de distribución de masas. La varianza de una variable aleatoria con media nula está dada por la media de los cuadrados de los valores que toma. La distribución chi-cuadrado es, por definición, la función de distribución de la variable aleatoria $\beta = \sum_{i=1}^{2c} X_i^2$, donde X_i son variables independientes distribuidas según una gaussiana con $\langle X_i \rangle = 0$ y $2c$ es el número de grados de libertad. Por tanto, una chi-cuadrado parece una elección natural para las fluctuaciones de la masa de nuestra partícula. Entonces tenemos

$$g(m) = \frac{1}{b\Gamma(c)} \left(\frac{\beta}{b}\right)^{c-1} e^{-\beta/b} \quad (3.7)$$

cuya media es bc y la desviación estándar es b^2c . Ahora podemos integrar Ec(3.6) para obtener

$$f(u) = \sqrt{\frac{b}{2\pi}} \frac{\Gamma(c+1/2)}{\Gamma(c)} \frac{1}{\left(1 + \frac{b}{2}u^2\right)^{c+1/2}} \quad (3.8)$$

Imponer la misma escala que en nuestros datos $\langle u \rangle = 1$ implica $2/b = 1$ y eligiendo $c = 3/2$ obtenemos

$$f(u) = \frac{2/\pi}{(1+u^2)^2} \quad (3.9)$$

que es la misma función que hemos encontrado antes para describir nuestros datos.

En rigor, el resultado que acabamos de alcanzar es válido para las burbujas, mientras que nosotros hemos analizado datos del movimiento de granos individuales. Para relacionar ambas descripciones utilizamos la definición de burbuja dada en [18]

$$\Delta \mathbf{R}_g = -\omega(\mathbf{r}_g, \mathbf{r}_b) \Delta \mathbf{R}_b \quad (3.10)$$

que significa: cuando una burbuja se mueve $\Delta \mathbf{R}_b$ cerca de \mathbf{r}_b ocasiona un desplazamiento $\Delta \mathbf{R}_g$ en el grano que está en \mathbf{r}_g . La función ω se denomina función de influencia y se extiende al área ocupada por la burbuja. Un cálculo sencillo basado en la conservación de volumen, y asumiendo que la función es escalar y simétrica, nos da $\omega = \Delta\phi/\phi^2$ donde ϕ es la fracción de volumen. Supongamos una variación de volumen $\Delta\phi/\phi = 1\%$ y una densidad $\phi = 0,8$ que es lo que típicamente encontramos en nuestros cálculos (los discos monodispersos tienden a estar muy empaquetados [20]); entonces

$\omega \simeq 10^{-3}$. Si introducimos la ecuación Ec(3.10) en Ec(3.9) vemos que la función de influencia corresponde a la desviación estándar del movimiento de los granos individuales. El valor estimado para esta función es el mismo que el obtenido para la desviación estándar de los granos, lo que cierra nuestra deducción.

Es interesante notar que la función Ec(3.8) es una función de Tsallis [21]

$$f(u) = \left(1 + \frac{1}{2}(q-1)\beta'u^2\right)^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.11)$$

con $c + \frac{1}{2} = \frac{1}{q-1}$ y $b = \beta'(q-1)$. Nuestra elección de c en Ec(3.9) fija el índice entrópico $c = 3/2 \rightarrow q = 3/2$.

Las distribuciones de Tsallis son las que aparecen en la mecánica estadística no extensiva. Se ha demostrado [22] que estas funciones son soluciones de una generalización de la ecuación de difusión

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.12)$$

en la que la ecuación se torna no lineal

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 [p(x,t)]^\nu}{\partial x^2} \quad (3.13)$$

donde ν es un número real. La solución es una función de Tsallis con argumento x^2 y se verifica la relación $q = 2 - \nu < 3$. El segundo momento de esta distribución es finito para $q < 5/3$, que es nuestro caso, y, entonces, el desplazamiento cuadrático medio escala en el tiempo como $\langle x^2 \rangle \propto t^{2/(3-q)}$. Sustituyendo $q = 3/2$ encontramos $\langle x^2 \rangle \propto t^{1.33}$, el mismo comportamiento que nuestros cálculos arrojan para el silo con orificio de salida pequeño y consistente con el valor encontrado para el silo con orificio mayor. La diferencia puede explicarse recordando que el proceso presentado en esta sección para deducir la función de distribución de los desplazamientos requiere de dos escalas de tiempo bien diferenciadas. Como indicamos más arriba, la evolución del perfil de velocidades es más lenta en el silo de abertura pequeña que en el silo con abertura mayor, de modo que las escalas de tiempo estarán más netamente separadas en el primero que en el último.

3.4. Comportamiento a tiempos largos.

En esta sección analizamos el comportamiento de los granos en escalas de tiempo grandes, cuando ha transcurrido el tiempo necesario para que un grano caiga dos veces su diámetro. En la FIG 3.5 mostramos las funciones de densidad de probabilidad obtenidas en la misma región del silo que las

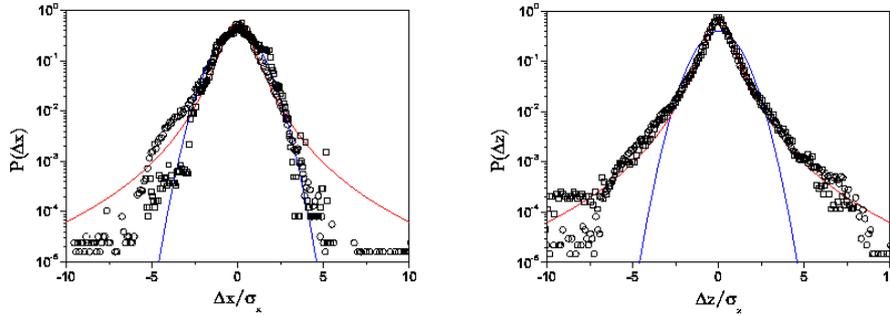


Figura 3.5: Funciones de distribución de los desplazamientos horizontales (izquierda) y verticales (derecha) a tiempos largos. Los círculos son datos obtenidos con el silo de abertura $3,8d$ y los cuadrados con el de $11d$. La línea roja es la Ec(3.4) y la azul una gaussiana.

mostradas antes. Vemos que la componente horizontal de los desplazamientos tiende a hacerse gaussiana, mientras que la componente vertical es no gaussiana. En el silo con orificio pequeño la componente horizontal aparece deformada debido probablemente a la presencia de gradientes de velocidad en la región de medida y a que la evolución es más lenta por la intermitencia del flujo.

Lo que vemos en el silo con orificio de salida grande es una transición a un movimiento difusivo en la dirección vertical a medida que el proceso de descarga descorrelaciona los movimientos en esta componente. El hecho de que la estadística no gaussiana persista en la dirección vertical se debe a la presencia de zonas de corte en esta componente, como puede verse claramente en el último cuadro de la FIG 3.2. La presencia de movimiento superdifusivo y estadística no gaussiana asociados a zonas de corte ha sido probado experimentalmente en [23].

En la FIG 3.6 se representa el *exceso de curtosis* definido como $\kappa_x = \langle x^4 \rangle / 3\langle x^2 \rangle^2 - 1$ y cuyo valor es cero para una distribución gaussiana. Puede comprobarse que esta cantidad tiende a cero para la componente horizontal del silo con orificio de salida grande.

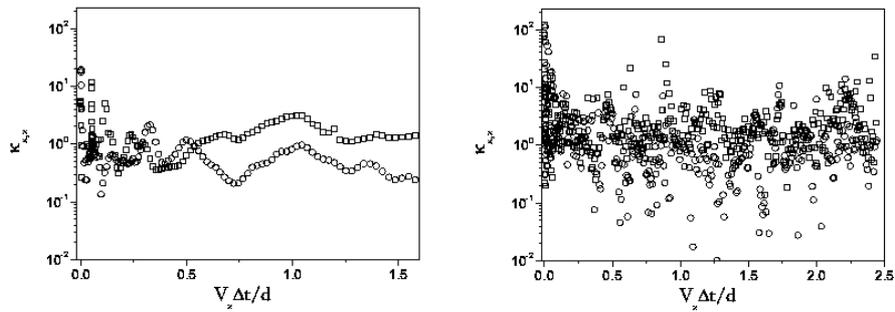


Figura 3.6: Curtosis de la distribución de desplazamientos horizontales y verticales en función de la distancia caída. A la izquierda los resultados para el silo de abertura $11d$, a la izquierda los del silo de abertura $3,8d$. Los círculos representan los datos en la componente horizontal y los cuadrados en la vertical.

Capítulo 4

Descarga de silos por gravedad II: flujo de salida.

4.1. Introducción.

El flujo de materia a través de un orificio en la base de un silo es una cantidad de evidente interés práctico que ha sido muy estudiada, sobre todo, por ingenieros [24]. Desde el punto de vista teórico puede utilizarse como un indicador de cambios en el comportamiento del medio granular en el interior del silo y de la proximidad de la región de atasco.

El resultado clásico es la llamada ley de Beverloo [25], estudiada experimentalmente, que establece cómo cambia el flujo en función del tamaño del orificio de salida

$$W(D) = C\sqrt{g\rho}(D - kd)^{5/2} \quad (4.1)$$

donde D es el diámetro del orificio, d el diámetro de los granos, g es la gravedad, ρ es la densidad del medio, C una constante relacionada con la fricción del medio y k una constante que depende del medio y está relacionada con la hipótesis del radio hidráulico. Esta última es, básicamente, la afirmación de que, debido a su tamaño finito, los granos no caen por un agujero de tamaño D sino por un agujero *efectivo* de tamaño algo menor. El valor de la constante es, aproximadamente, $k \sim 1,5$ para muchos materiales, aunque llega a 2,9 para la arena. El exponente cambia de 5/2 en tres dimensiones a 3/2 en dos.

La forma de ley de Beverloo puede obtenerse mediante análisis dimensional suponiendo que el flujo depende de la densidad del medio, el tamaño del orificio de salida y la gravedad. Para entender el resultado se suele apelar a la hipótesis del arco de caída libre. Esta afirma que existe una región, con la forma aproximada de un arco de altura proporcional al tamaño del orificio de salida, por encima de la cual el material está densamente empaquetado y

sin libertad para moverse; pero, por debajo, los granos están más separados, sueltos y caen libremente constituyendo el flujo que se mide a la salida del silo.

La ley de Beverloo funciona bien con orificios de tamaño mucho mayor que el de los granos que constituyen el medio, sin embargo, como expoundremos en este capítulo, presenta desviaciones cuando el orificio y los granos son de tamaño comparable. Veremos que, teniendo en cuenta variaciones de la densidad del medio en función del orificio de salida, podemos obtener una nueva ley que ajusta bien todo el rango de observación.

El modelo de fuerzas y los valores de las constantes que usamos para obtener los resultados expuestos en este capítulo son los mismos que los usados en el capítulo anterior.

4.2. Flujo en función del orificio de salida.

El proceso de descarga es igual al descrito en el último capítulo salvo que ahora los granos son depositados en la parte superior del silo a medida que salen por el orificio de la base. Este proceso de rellenado garantiza que la altura del silo permanece aproximadamente constante durante toda la toma de datos, que es de mayor duración que antes.

Medimos el flujo en número de granos por bloque de tiempo, o pasos de integración, haciendo 100 medidas de 10^4 pasos de duración cada una. Desechamos los resultados de los 10000 primeros pasos para dar tiempo suficiente a que el flujo se haga estacionario. Para cada tamaño del orificio de salida tomamos como valor del flujo el promedio de las 100 medidas. El resultado puede verse en la FIG 4.1 que muestra el flujo frente al diámetro del orificio de salida en escala lineal y logarítmica junto con un ajuste a la ley de Beverloo. En el gráfico en escala logarítmica podemos ver claramente que la ley de Beverloo no ajusta los datos cuando el orificio de salida es pequeño.

4.2.1. Flujo resuelto en el tiempo.

La serie temporal del flujo contiene información que perdemos al tomar la media, por lo que la analizaremos en esta sección. Para poder comparar fácilmente los flujos obtenidos con los distintos orificios de salida definiremos, para cada uno un flujo *reducido*

$$w(t) \equiv \frac{W(t)}{\langle W(t) \rangle} \quad (4.2)$$

donde el promedio es temporal. En la FIG 4.2 podemos ver el flujo reducido en función del tiempo para tres orificios de salida distintos. Cuando el orificio

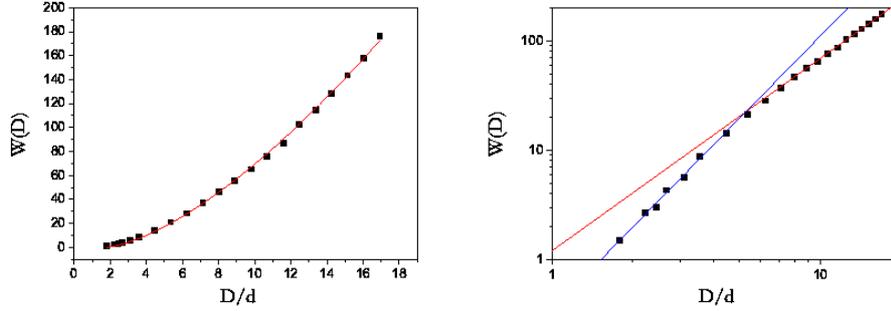


Figura 4.1: Flujo en número de granos por bloque de tiempo en función del diámetro del orificio de salida, en escala lineal (izquierda) y logarítmica (derecha). La línea roja en el panel izquierdo es un ajuste a la ley de Beverloo en dos dimensiones. En el panel derecho, la línea roja tiene pendiente 1,5 (ley de Beverloo) y la azul 2,5

es pequeño el flujo presenta grandes oscilaciones en torno al valor medio que se atenúan considerablemente a medida que el orificio se hace mayor. Podemos caracterizar estas fluctuaciones por su desviación estándar

$$\sigma_w = \sqrt{\langle w^2 \rangle - \langle w \rangle^2} = \sqrt{\langle w^2 \rangle - 1} \quad (4.3)$$

y representando esta cantidad en función del diámetro del orificio de salida obtenemos el resultado mostrado en la FIG 4.2. Si el diámetro adimensional del orificio es menor que, aproximadamente, 9 la desviación estándar decae como $(D/d)^{-2}$, mientras que para diámetros mayores se hace constante. Buscando una mayor caracterización de estas fluctuaciones, elaboramos el histograma de la amplitud de oscilación Δw separando los resultados obtenidos con orificios de tamaño $9d$ o menor por un lado y los mayores por otro. Los histogramas normalizados y con la amplitud escalada según la desviación estándar se muestran en la FIG 4.3. El histograma de las fluctuaciones correspondientes a orificios grandes es gaussiano, mientras que para orificios pequeños está dado por

$$P(\Delta w) = \frac{2/\pi}{(1 + (\Delta w)^2)^2} \quad (4.4)$$

que es la misma distribución que ya encontramos para los movimientos individuales de los granos.

Es decir, en la región donde la ley de Beverloo no es válida las fluctuaciones dependen del radio de salida y siguen una función de distribución igual a la encontrada para los desplazamientos individuales de los granos. Mientras

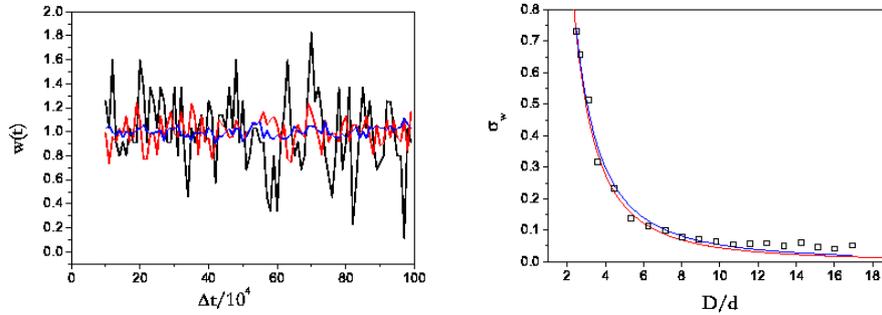


Figura 4.2: Izquierda: flujo reducido en función del número de pasos de integración para orificios de diámetro adimensional 3,56(negro), 6,24(rojo) y 16,04(azul). Derecha: desviación estándar de la amplitud de oscilación del flujo reducido en función del diámetro del orificio de salida. Un ajuste potencial de todos los datos, en azul, da una dependencia $(D/d)^{-1,87}$. La línea roja es la curva $(D/d)^{-2}$.

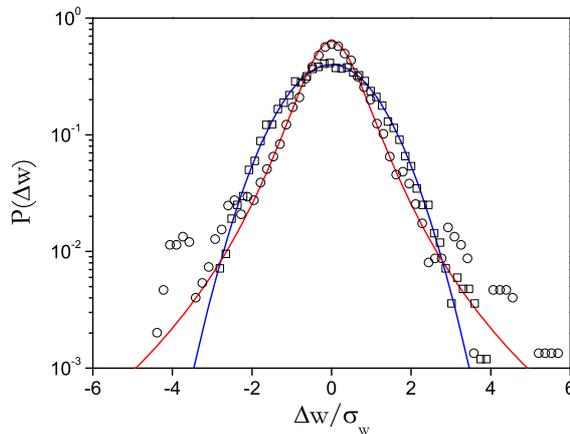


Figura 4.3: Función de distribución de la amplitud de oscilación del flujo reducido. Los círculos corresponden a flujos medidos con orificios menores que $9d$, los cuadrados para el resto. La línea azul es una gaussiana y la roja es la Ec(4.4).

que en la región donde se aplica la ley de Beverloo, las fluctuaciones son constantes en su amplitud y siguen una distribución gaussiana.

Estos resultados pueden entenderse de la siguiente forma: al tomar la variable w estamos haciendo una “reducción” del movimiento de muchos granos al de uno sólo, por eso oscila en torno a 1. El hecho de que esta cantidad experimente una fluctuación positiva (un pico hacia arriba) o negativa será debido, respectivamente, al hecho de que un grano entre o salga (en el movimiento aleatorio de los granos ambas son posibles) de la región “fluidizada” desde la que caen. Estas probabilidades de entrar o salir de dicha región están dadas por las funciones de distribución de los desplazamientos individuales de los granos, que se reflejan, por tanto, en la cantidad w .

Para completar el argumento hay que tener en cuenta un detalle: las funciones de distribución de los granos las hemos obtenido para un tiempo corto (el inicio de la descarga), mientras que las de las fluctuaciones del flujo las obtenemos de tiempos relativamente largos. En el caso de las funciones de distribución gaussianas no hay problema pues, al inicio de la descarga ya medimos durante un tiempo suficiente para que el movimiento se haga gaussiano FIG 3.5 y, por lo tanto, lo seguirá siendo para tiempos mayores.

En el caso no gaussiano, lo que ocurre es que, si bien el flujo no se detiene indefinidamente, sí experimenta obstrucciones durante las que se hace casi nulo (y cero para agujeros pequeños). El tiempo que media entre dos obstrucciones no es lo bastante grande para que el movimiento de los granos se haga gaussiano. Por eso, aunque midamos tiempo después de haber abierto el orificio, lo estaremos haciendo poco después de una obstrucción y el sistema se comporta como si estuviera iniciando la descarga.

4.3. Densidad en la región fluidizada.

Una forma sencilla de obtener la ley de Beverloo es la siguiente. En la figura FIG 4.4 hemos marcado la región que ocupan los ΔN granos que van a caer en el intervalo Δt . Este número es

$$\Delta N = \rho D L = \rho D v \Delta t \quad (4.5)$$

donde ρ es la densidad en número de granos por unidad de área y v la velocidad promedio a la que caen los granos. El flujo es, en número de granos por unidad de tiempo,

$$W = \frac{\Delta N}{\Delta t} = \rho D v \quad (4.6)$$

siguiendo la hipótesis del arco de caída libre escribimos $v \sim \sqrt{gD}$ y obtenemos la ley de Beverloo en dos dimensiones. En tres dimensiones el razonamiento es totalmente análogo. Hemos visto que esta ley no es apropiada

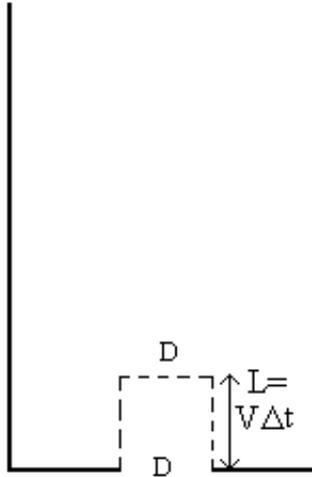


Figura 4.4: Esquema para obtener la ley de Beverloo. Aquí D es el diámetro del orificio de salida, V es la velocidad media de los granos en la zona recuadrada por la línea discontinua y Δt el tiempo en el que caen los granos presentes en esa zona.

cuando el tamaño del orificio de salida se hace comparable al de los granos. A la vista de Ec(4.6) vemos que si mantenemos la hipótesis del arco de caída libre sólo podemos cambiar la densidad para encontrar una ley semejante y que dé cuenta de los resultados.

Medimos la densidad en la región de salida tomando una región cuadrada de las dimensiones del orificio de salida. Si tomamos la base de este cuadrado coincidente con la base del silo, ocurre que, en la región de flujo intermitente, hay intervalos de tiempo en los que una parte del cuadrado está vacía. Además el área de la región de medida que no está ocupada cambia en el tiempo introduciendo fuertes oscilaciones en las medidas. Para evitar esto, tomamos la base del cuadrado de medida a una altura de unos seis diámetros de grano. Los resultados que se obtienen se muestran en la figura FIG 4.5, donde la densidad es la fracción de volumen ocupada por los granos. La densidad puede ajustarse con la expresión

$$\rho = \rho_0 \left(1 - ae^{-bD}\right) \quad (4.7)$$

Parece contraintuitivo que la densidad sea menor con orificios pequeños que con grandes, pues aquellos al tender a obstruir el flujo deberían dar lugar a mayores densidades. El resultado se comprende si tenemos en cuenta que las medidas se realizan en la región fluidizada. Cuando el orificio de salida es pequeño y tienden a formarse arcos, el material es inyectado poco a poco

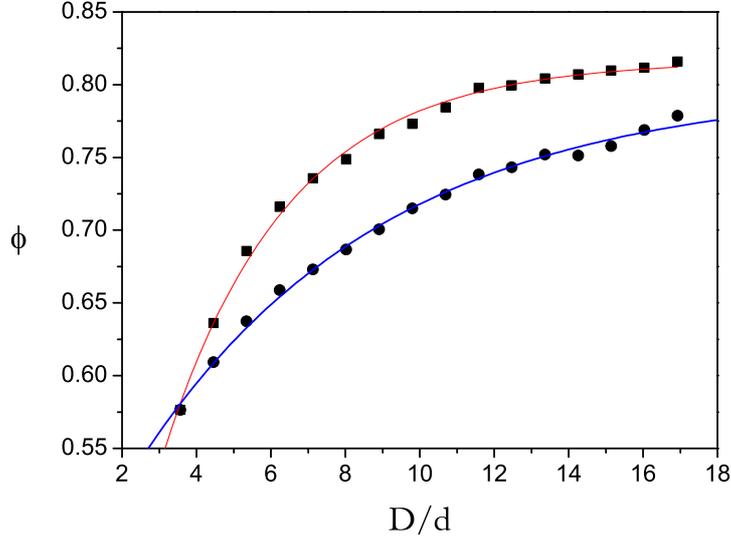


Figura 4.5: La densidad del medio en la zona de caída. La densidad se mide en términos de la fracción de compactación: fracción de volumen ocupado por los granos sobre el volumen total del área de medida. Cuadrados y círculos corresponden a dos formas distintas de cambiar el tamaño de la zona de medida con el orificio de salida. Ambas pueden ajustarse con la Ec(4.7) como muestran las líneas continuas.

en dicha región desde las zonas más altas del silo (donde la densidad sí es alta) y tiene, por tanto, una baja densidad. A medida que se incrementa el tamaño del orificio de salida, se inyecta más material en la zona fluidizada y a mayor ritmo, pues cada vez hay menor probabilidad de que se formen arcos y, por tanto, la densidad aumenta. A partir de un determinado tamaño de orificio, la probabilidad de que se forme un arco será prácticamente nula en adelante, con lo que el ritmo al que se introduce material, y su densidad, en la zona fluidizada no cambian más.

Basándonos en la presencia de arcos existe un argumento que nos lleva a la expresión Ec(4.7). Refiriéndonos a la figura FIG 4.4 definamos el número de filas de granos que caen en el intervalo Δt

$$N_F = \frac{\Delta N}{D} = \rho v \Delta t \quad (4.8)$$

y el número de granos en la región de caída es $\Delta N = N_F D$. Cuando el tamaño del orificio se hace pequeño empiezan a formarse arcos, hecho que se manifiesta en el aumento de las fluctuaciones del flujo, cuyo efecto será hacer

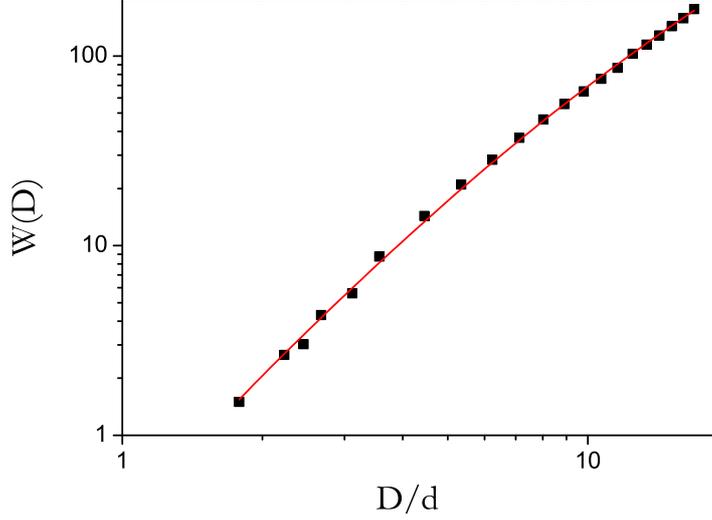


Figura 4.6: El flujo ajustado con la Ec(4.15) mostrando que la nueva ley es válida para todo el rango de observación.

que en Δt caigan $N'_F < N_F$ filas de granos. Escribiremos N'_F como N_F menos el número de arcos. Para estimar este último, supondremos que la distribución de longitudes de los arcos es la misma que la de las cadenas de fuerza que se dan en los medios granulares, es decir, una exponencial [26]

$$P(l) = \beta e^{-\beta l} \quad (4.9)$$

donde β es una constante. Para cada valor de D estamos interesados en arcos de longitud l mayor que un cierto l_0 relacionado con aquél, ya que arcos menores no pueden sostenerse y son arrastrados por el flujo. Por tanto, podemos escribir

$$N'_F = N_F - AP(l > l_0) = N_F - Ae^{-\beta l_0} \quad (4.10)$$

donde A es una constante. Ahora el número de granos que caen es $\Delta N' = N'_F D$ y el flujo, usando las expresiones anteriores,

$$\frac{\Delta N'}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} (N_F - Ae^{-\beta l_0}) D \quad (4.11)$$

$$= \frac{1}{\Delta t} (\rho v \Delta t - Ae^{-\beta l_0}) D \quad (4.12)$$

$$= \rho \left(1 - \frac{A}{\rho v \Delta t} e^{-\beta l_0} \right) v D \quad (4.13)$$

y, recapitulando, podemos escribir

$$w' = \rho' Dv \quad (4.14)$$

$$\rho' = \rho (1 - Ae^{-bD}) \quad (4.15)$$

en el último paso hemos redefinido la constante A y hemos puesto bD en lugar de βl_0 puesto que l_0 es, esencialmente, D salvo una constante.

En la figura FIG 4.6 representamos el flujo ajustándolo con la ley Ec(4.15) y comprobamos que puede ajustarse todo el rango de observación.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas.

El presente trabajo se ha centrado en el estudio mediante técnicas numéricas de los medios granulares secos. Los dos primeros capítulos los hemos dedicado a exponer los algoritmos más habituales encontrados en la literatura y a un análisis detallado del método de dinámica molecular de partículas blandas. Los capítulos tercero y cuarto muestran la aplicación de este método a la descarga de silos por gravedad.

En el capítulo tercero examinamos el movimiento difusivo de los granos al inicio de la descarga. Encontramos que las funciones de distribución de los desplazamientos son no gaussianas, caracterizadas por colas anchas. El movimiento de los granos es superdifusivo, es decir, el desplazamiento cuadrático medio escala con el tiempo con un exponente mayor que la unidad. Hemos propuesto una ley para ajustar las funciones de distribución encontradas, así como una hipótesis sobre su origen, basada en el movimiento colectivo de los granos y hemos señalado una posible conexión con la mecánica estadística no extensiva. También mostramos que el perfil de velocidades en el interior del silo, al inicio de la descarga, presenta estructuras peculiares que evolucionan hasta que se establece el perfil característico del estado estacionario.

El enfoque difusivo de los medios granulares densos y, en particular, en el silo no es nuevo, como hemos señalado [14, 15]. Sin embargo, los resultados expuestos en este trabajo apuntan a una necesidad de revisar los modelos teóricos puesto que estos no tienen en cuenta el escenario de difusión anómala al inicio de la descarga ni la evolución del perfil de velocidades.

La mecánica estadística no extensiva se asocia de manera natural con una generalización no lineal de la ecuación de difusión, pues las soluciones de esta son distribuciones de Tsallis. El hecho de que las funciones de distribución que hemos encontrado para los desplazamientos de los granos sean también funciones de Tsallis nos hace pensar en la difusión no lineal, y la

termodinámica no extensiva, como un marco teórico apropiado para nuestro problema. Este enfoque podría constituir la generalización antes mencionada.

El capítulo cuarto se centra en el estudio del silo a escala macroscópica, en concreto, analizamos el flujo de materia a través de un orificio practicado en su base. Este es un problema de interés práctico que ha sido abordado experimentalmente y para el que existen resultados en la literatura. Estos, sin embargo, se centran en estudiar los flujos cuando los orificios de salida son grandes comparados con el tamaño de los granos. Al estudiar lo que sucede cuando ambos tamaños son comparables ($D \leq 9d$) hemos encontrado desviaciones respecto a las leyes empíricas aceptadas. Al analizar el flujo en estado estacionario, encontramos que las fluctuaciones del mismo son gaussianas en la región de tamaños donde son válidas las leyes experimentales, mientras que son no gaussianas en la región de orificios de salida pequeños. Hemos explicado cómo estas últimas fluctuaciones se relacionan con el movimiento a pequeña escala de los granos.

Cuando el tamaño de la abertura es pequeño, el flujo está afectado por la formación de arcos entre los granos que llevan a la detención momentánea del mismo, dando lugar a las fluctuaciones mencionadas. Basándonos en la presencia de arcos hemos deducido una ley para ajustar el flujo en todo el rango de tamaños de la salida observados. Esta ley puede traducirse en una modificación de la densidad del medio granular en la región de salida, que pasa de ser constante para aberturas grandes a ser dependiente del diámetro del orificio cuando este es pequeño. Este punto ha sido constatado midiendo dicha densidad y comprobando que puede ajustarse a la expresión obtenida.

El trabajo hasta ahora realizado puede extenderse en varios frentes. En primer lugar, en el aspecto “microscópico” introducido en el capítulo tercero, hemos extendido los cálculos a tiempos de caída aún mayores, de modo que un grano se desplaza una decena de veces su diámetro. Estos resultados deben compararse con los obtenidos a tiempos cortos. En este ámbito sería deseable encontrar una motivación rigurosa del uso de la estadística no extensiva, hecho que pasaría por desarrollar una teoría o modelo microscópico del movimiento de los granos en el silo.

En cuanto al estudio del flujo, nuestros resultados relativos a las fluctuaciones están pendientes de una comparación con los resultados experimentales. De esta comparación podrían surgir argumentos más rigurosos que los presentados para la modificación de la ley de Beverloo. El análisis del flujo con orificios pequeños puede completarse con el estudio de las avalanchas: cantidad de granos que caen entre dos obstrucciones. Estas medidas se han llevado a cabo experimentalmente y su análisis nos ayudaría a arrojar luz sobre el mecanismo de formación de arcos que obstruyen el flujo.

Bibliografía

- [1] J. Duran, *Sands, powders and grains*, Springer-Verlag, New York, 1999.
- [2] D. C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, Cambridge University Press, Cambridge, UK; New York, NY; 2004.
- [3] J. Schäfer, S. Dippel y D. E. Wolf, *Force schemes in simulations of granular materials*, J. Phys. I (1996), 5-20.
- [4] T. Pöschel y T. Schwager, *Computational granular dynamics: models and algorithms*, Springer, Berlin, 2005.
- [5] M. Jean y J. J. Moreau, *Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections*, Proceedings of Contact Mechanics International Symposium, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne, Switzerland, 1992, pp. 3148.
- [6] T. Unger y J. Kertesz, *The contact dynamics method for granular media*, en *Modelling of complex systems: seventh granada lectures*. AIP Conference Proceedings, volumen 661, 2003, pp. 116-138.
- [7] G. A. Bird, *Molecular dynamics and the direct simulation of gas flow*, Oxford Science Publications, Oxford, 1994.
- [8] M. Müller, S. Luding y H. J. Herrmann, *Simulations of vibrated granular media in 2D and 3D*, en D. E. Wolf y P. Grassberger, eds., *Friction, Arching and Contact Dynamics*. World Scientific, Singapore, 1997.
- [9] H. J. Herrmann, *Simulating granular media on the computer*, 3rd Granada Lectures in Computational Physics, eds. P.L. Garrido and J. Marro (Springer, Heidelberg, 1995), pp.67-114
- [10] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, Clarendon Press, Oxford, 1989.
- [11] L. E. Silbert, G. S. Grest y J. W. Landry, *Statistics of the contact network in frictional and frictionless granular packings*, Phys. Rev. E **66** (2002), 061303.

- [12] Richard L. Burden y J. Douglas Faires, *Análisis numérico*, Grupo Editorial Iberoamrica, México, 1991.
- [13] Herbert Goldstein, *Mecánica clásica* Aguilar, Madrid, 1966.
- [14] J. Litwiniyszyn, *The model of a random walk of particles adapted to researches on problems of mechanics of granular media*, Bull. Acad. Pol. Sci. **11** (1963), 593.
- [15] J. Mullins, *Stochastic theory of particle flow under gravity*, J. Applied Physics **43** (1972), 665-678.
- [16] R. M. Nedderman y U. Tüzün, *A kinematic model for the flow of granular materials*, Powder Technology **22** (1979), 243.
- [17] J. Choi, A. Kudrolli, R. R. Rosales y M. Z. Bazant, *Diffusion and mixing in gravity-driven dense granular flows*, Phys. Rev. Lett. **92** (2004), 174301.
- [18] M. Z. Bazant, *The Spot model for granular drainage*, Mechanics of Materials **38** (2006), 717.
- [19] M. Ausloos y R. Lambiotte, *Brownian particle having a fluctuating mass*, Phys. Rev. E **73** (2006), 011105.
- [20] R. Arévalo, D. Maza y L. Pugnaloni, *Identification of arches in 2D granular packings*, Phys. Rev. E **74** (2006), 021303.
- [21] C. Tsallis, *Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics*, J. Stat. Phys. **52** (1998), 479.
- [22] C. Tsallis, A. M. C. de Souza y R. Maynard, *Lévy flights and related topics in physics*, editado por M. Schlessinger, G. M. Zaslavsky y U. Frisch, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1995.
- [23] B. Utter y R. P. Behringer, *Self-diffusion in dense granular shear flows*, Phys. Rev. E **69** (2004), 031308.
- [24] R. M. Nedderman, *Statics and kinematics of granular materials*, Nova Science, 1991.
- [25] W. A. Beverloo, H. A. Leniger y J. Van de Velde, *The flow of granular solids through orifices*, Chem. Eng. Sci (1961).
- [26] J. F. Peters, M. Muthuswamy, J. Wibowo y A. Tordesillas, *Characterization of force chains in granular material*, Phys. Rev. E **72** (2005), 041307.