



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y CENTRO DE
QUÍMICA- INSTITUTO DE CIENCIAS

POSGRADO EN CIENCIAS QUÍMICAS

TESIS

DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE
SOFTWARE DE DINÁMICA MOLECULAR 2D
PARA SIMULACIONES DE MATERIA
GRANULAR REPULSIVA

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
MAESTRÍA EN CIENCIAS QUÍMICAS EN EL ÁREA DE
FISICOQUÍMICA

PRESENTA:
QUÍM. ELIUD MORALES DÁVILA
(784022)

DIRECTOR DE TESIS:
DR. JULIO MANUEL HERNÁNDEZ PÉREZ
(36116)

ASESOR DE TESIS:
DR. JUAN MANUEL SOLANO ALTAMIRANO
(48876)

PUEBLA, PUE. OCTUBRE 2018

"Un modelo resulta siempre parcial, pero ofrece recursos para progresar en el conocimiento."

Jean-Pierre Changeux

Dedicatoria

A mi familia.

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología la beca otorgada para realizar la maestría (No. 784022).

Agradezco a la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado el apoyo otorgado para la conclusión de esta tesis dentro del Programa II. Investigación y Posgrado. Aseguramiento de la calidad en el Posgrado. Indicador establecido en el Plan de Desarrollo Institucional 2013-2017.

Agradezco a todos los que directa e indirectamente contribuyeron a la realización del trabajo de tesis. Especialmente a mis asesores, Dr. Julio Manuel Hernández Pérez y Dr. Juan Manuel Solano Altamirano, que me apoyaron y guiaron durante la maestría.

Agradezco al Dr. Felipe Pacheco Vázquez la colaboración y la accesibilidad para permitirme realizar algunos experimentos en su laboratorio.

Agradezco a mis sinodales la dedicación que prestaron al revisar el presente trabajo.

Agradezco a la Dra. Helena Franco Carcedo la revisión de gramática y estilo en el presente trabajo.

Agradezco al *International Centre for Theoretical Physics* el financiamiento en el curso *Latin American School to Parallel Programming and Parallel Architecture for HPC*

El trabajo de tesis fue presentado en la *XVI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica* (16-18 de Noviembre del 2017, Pue., Puebla, México): Eliud Morales Dávila, Julio Manuel Hernández-Pérez, Juan Manuel Solano-Altamirano, *Calibración del programa DEMDySiGMA para un sistema de materia granular repulsiva*.

Una versión del código de DEMDySiGMA se paralelizó en el curso *Latin American School to Parallel Programming and Parallel Architecture for HPC* impartido por el *International Centre for Theoretical Physics* (12-23 de Febrero del 2018, ABACUS-CINVESTAV, Ocoyoacan, Estado de México, México).

Contenido

Índice de figuras	viii
Índice de tablas	xiii
Notación	xiv
Introducción	1
1 Antecedentes	4
1.1 Historia de la materia granular	5
1.2 Impacto de la materia granular	9
1.3 Motivación.....	11
1.4 Objetivo general	12
1.5 Objetivos particulares	12
2 Fundamentos teóricos	14
2.1 Descripción del sistema experimental original	14
2.2 Comportamiento del flujo de materia granular	16
2.2.1 Flujo granular	16
2.3 Dinámica molecular	18

CONTENIDO

2.3.1	Fuerzas que describen al sistema	19
2.3.2	Algoritmo velocity Verlet.....	21
2.4	El programa DEMDySiGMa.....	23
2.5	Metodología.....	24
3	Resultados y discusión	27
3.1	Cálculo del momento magnético.....	28
3.2	Cálculo de propiedades.....	29
3.3	Cálculo del coeficiente de fricción efectivo	31
3.4	Simulaciones del silo con paredes laterales no repulsivas.....	31
3.5	Simulaciones del silo con paredes laterales repulsivas	35
3.6	Diferencias entre las cadenas de fuerzas de un sistema granular estándar y uno repulsivo	47
4	Conclusiones	50
A	Celda Hele-Shaw	52
B	Deducción matemática del flujo	54
C	Momento magnético	57
	Referencias	62

Índice de figuras

1.1	Ejemplos de materia granular.....	5
1.2	Figuras sonoras de Chladni.	7
1.3	Cadena de fuerzas en materia granular estándar, los colores en la figura dependen de la fuerza de fricción, cuanto mayor es la fuerza, más oscuro es el color.....	8
1.4	Arco formado por la fuerza de fricción.....	10
2.1	A) y B) Imágenes del silo experimental bidimensional lleno con materia granular repulsiva. C) Arco magnético observado en orificios pequeños	15
2.2	Fuerzas que actúan en la descarga del silo	20
2.3	Programa DEMDySiGMa	23
2.4	Flujo de trabajo con los subprogramas que componen DEMDySiGMa.	26
3.1	a) Fotografía del experimento. Esquema para obtener el momento magnético entre dos imanes. b) El peso en función de la distancia. Los puntos son los datos experimentales con barras de error, la línea continua representa ajuste con la ecuación $a/(x - b)^4$	28
3.2	Esquema de la caja imaginaria que se usa en el conteo de partículas	29
3.3	Esquema de la línea de referencia que se usa en el conteo del número de partículas liberadas en la descarga del silo	30

3.4 Flujo granular, Q , vs diámetro del orificio del silo, D . Los puntos **K** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.15$. Los puntos **V** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.20$. Los puntos **•** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. Cada serie, para cada valor de μ_{eff} , está unida por una línea punteada. La línea continua oscura y gruesa representa a la ley modificada de Beverloo (Ec. 2.3 usando $\rho_{\infty} = 1342 \text{ granos/m}^2$, $\rho_0 = 4737 \text{ granos/m}^2$ y $\sigma = 0.029 \text{ m}$ obtenidos de la parte experimental [1]). . .32

3.5 **a)** Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo a diferentes tamaños de orificio obtenida de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. El tiempo está normalizado con el tiempo de descarga T . **b)** Evolución temporal de la velocidad en función del tamaño del orificio obtenida de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. La línea continua corresponde a la ecuación $\sqrt{\frac{2g\beta D}{\rho}}$ (v. Ec. 2.3), usamos el valor experimental de $\beta = 0.22$. Las barras de error son del tamaño del punto.....33

3.6 **a)** Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes orificios obtenida de las simulaciones con un $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. **b)** Evolución temporal de la densidad en función del tamaño del orificio obtenida de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. La línea continua corresponde a la ecuación $\rho_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\frac{D}{\sigma}}$ (usamos los valores experimentales de ρ_0 , ρ_{∞} y σ [1]). Las barras de error son del tamaño del punto34

3.7 Imágenes del sistema experimental y de los sistemas usados en las simulaciones. **A)** Esquema del sistema experimental original, el cual tiene paredes repulsivas. **B)** Esquema del sistema de las simulaciones sin paredes repulsivas (véase sección 3.4). **C)** Esquema del sistema de las simulaciones análogo al experimental (véase sección 3.5).35

3.8 **A)** y **B)** Imágenes obtenidas de DEMDySiGMA del silo bidimensional lleno con materia granular repulsiva. **C)** Arco magnético observado en orificios pequeños. **D)** Imagen ampliada en la que se muestra la separación entre las partículas y las paredes laterales, debido a la repulsión pared lateral-partícula.....36

ÍNDICE DE FIGURAS

3.9	Ejemplo de la descarga del silo lleno de materia granular repulsiva usando $D = 0.04$ m y $\mu_{\text{eff}} = 0.23$	37
3.10	Partículas liberadas en función del tiempo en silos con diferentes tamaños de orificio. Los círculos rojos muestran las fluctuaciones de las partículas liberadas a coeficientes de fricción de 0.20 (a) y 0.25 (b).....	38
3.11	a) Partículas liberadas en función del tiempo a diferentes tamaños de orificio obtenidas de las simulaciones usando un valor $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. b) Partículas liberadas en función del tiempo a diferentes tamaños de orificio obtenidas experimentalmente.....	39
3.12	El flujo, Q , en función del tamaño del orificio en la salida del silo. a) Flujo obtenido de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.20$. b) Flujo obtenido de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. En los dos casos la línea continua corresponde a la ecuación modificada de Beverloo (usamos los valores experimentales de ρ_0 , ρ_∞ y σ en la ecuación 2.3). En a) y b) las barras de error son del tamaño del punto.....	41
3.13	a) Representa el flujo en función del tamaño del orificio del silo obtenido de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. b) Representa el flujo en función del tamaño del orificio obtenido experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa la ley modificada de Beverloo, el ajuste se realiza con los valores experimentales de ρ_∞ , ρ_0 y σ	42
3.14	a) Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo con diferentes D obtenido de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. b) Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo con diferentes D obtenido experimentalmente. En ambos casos el tiempo está normalizado con el tiempo de descarga T	43

ÍNDICE DE FIGURAS

3.15 a) Evolución temporal de la velocidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida por simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. b) Evolución temporal de la velocidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa el comportamiento ideal de la velocidad.	44
3.16 a) Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes D obtenida de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. b) Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes D obtenida experimentalmente	45
3.17 a) Evolución temporal de la densidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida mediante simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. b) Evolución temporal de la densidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa la tendencia de la ecuación $\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty}) e^{-\frac{D}{a}}$, donde usamos los valores de ρ_0 , ρ_{∞} y a obtenidos experimentalmente	46
3.18 Ajuste con la ecuación $\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty}) e^{-\frac{D}{a}}$ para obtener los valores de ρ_{∞} , ρ_0 y a . Las barras de error son del tamaño del punto	47
3.19 Imágenes obtenidas mediante simulaciones con DEMDySiGMa. a) Patrón formado por la distribución de las cadenas de fuerzas en materia granular estándar. b) Patrón formado por la distribución de las cadenas de fuerzas en materia granular repulsiva.	49
A.1 Esquema de la celda Hele-Shaw.....	52

ÍNDICE DE FIGURAS

- B.1 Esquema en la salida del silo. Existe la formación de un arco proporcional al tamaño del orificio de la salida (p. ej. si el arco es semicircular, el valor de $\beta = 0.5$). Se muestra que el sistema tiene una densidad promedio. La velocidad que experimentan las partículas en la salida es de caída libre. D es el tamaño del orificio y h es la distancia que recorre el contenido para salir del silo56
- C.1 Fotografía del experimento para obtener el momento magnético entre dos imanes.....58
- C.2 Peso como función de la distancia. Los puntos son los datos experimentales con barras de error. Línea continua ajuste con la ecuación $a/(x-b)^4$ 59
- C.3 Gráfico del $\ln(P)$ vs el $\ln(x)$. La línea recta representa el ajuste lineal $\ln(P) = \ln(a) + B \ln(x)$. Los puntos son los pesos obtenidos experimentalmente..... 60

Índice de tablas

C.1 Valores del peso para calcular el momento magnético	58
---	----

Notación

La notación utilizada en el texto se resume a continuación:

DEMDySiGMa *Discrete Element Molecular Dynamics Simulator for Granular Materials.*

D	Orificio en la salida del silo.
d	Diámetro de las partículas (5 mm).
\vec{F}_i	Fuerza total que actúa sobre la partícula i ésima.
\vec{F}_i^w	Fuerza de fricción producida por el rozamiento con las paredes
\vec{F}_{ij}^d	Fuerza de repulsión entre dos dipolos magnéticos.
$\vec{F}_{i\alpha}^{pw}$	Fuerza de repulsión entre discos y paredes producida por choques inelásticos.
$\vec{F}_{i\beta}^{prw}$	Fuerza de repulsión entre discos y paredes repulsivas frontales.
g	Constante gravitacional (9.8 m/s^2).
M	Momento magnético.
m	Masa de las partículas (0.4 g).
N_{out}	Número de partículas fuera del silo.
N_{tot}	Número total de partículas (565 partículas).
$\frac{N_{out}}{N_{tot}}$	Fracción de partículas liberadas del silo.
Q	Flujo.

T	Tiempo de la descarga del silo.
t	Tiempo.
t_n	Tiempo en el enésimo paso.
v_{out}	Velocidad en la salida del silo.
\ddot{x}_i	Segunda derivada temporal con respecto a la posición.
ρ	Densidad en la salida del silo.
ρ_0	Densidad en la cercanía de la salida del silo cuando está cerrado.
ρ_∞	Densidad en la cercanía de la salida del silo cuando tiene tamaños del orificio grandes.
μ_{eff}	Coefficiente de fricción efectivo (adimensional).
$\langle \rangle$	Promedio de las propiedades.
$\langle \rangle_x$	Promedio de las propiedades sobre el orificio de salida.
$\langle \rangle_{x,t}$	Promedio de las propiedades sobre el orificio de salida y durante todo el tiempo de descarga.

Introducción

El avance del conocimiento en nuestros días no sólo depende de la mejora de los modelos que tenemos para describir a la naturaleza y de la concepción de nuevas teorías, sino también del desarrollo de herramientas numéricas, instrumentales y tecnológicas. De igual forma, el desarrollo de *software* especializado desempeña un papel importante. Por ejemplo, el *software* es necesario para controlar equipos instrumentales, para procesar la información y por supuesto para implementar los modelos teóricos que no pueden resolverse analíticamente, es decir, los modelos que únicamente se pueden resolver con métodos numéricos.

Por otra parte, el carácter interdisciplinario de los nuevos campos de estudio, p. ej. la química ambiental, la nanotecnología, la física de sistemas complejos, etc., requieren de la participación de estudiantes e investigadores de diversas disciplinas tradicionales. En este contexto, el desarrollo de *software* científico que pueda resolver y/o aportar información útil de estos problemas interdisciplinarios resulta por demás valioso y necesario, pero al mismo tiempo requiere de habilidades tanto de ciencias duras (como física, química y matemáticas), como también de habilidades de programación y diseño de *software*.

En el Laboratorio de Fisicoquímica Teórica de la BUAP estamos desarrollando herramientas y preparándonos para trabajar en problemas complejos e interdisciplinarios de química teórica, química computacional, biofísica, termoquímica teórica, y algunos problemas de la física de sistemas complejos, como la materia granular y fractales, todo bajo un esquema colaborativo con diversos grupos de investigación. Todo esto conlleva proponer proyectos de investigación cuyos resultados serán aplicables a largo plazo, por ello, el presente trabajo

se enfoca en el desarrollo y validación de un *software* de dinámica molecular para estudiar sistemas granulares repulsivos en dos dimensiones. Estos sistemas están compuestos por un gran número de partículas macroscópicas que en conjunto muestran propiedades colectivas, es decir, que surgen como consecuencia de que el sistema es de muchos cuerpos, de que la dinámica en conjunto es altamente no lineal y de que todas y cada una de las partículas que constituyen el sistema se repelen entre sí (de aquí lo 'repulsivo' del sistema).

El interés por estos sistemas se debe en parte a la colaboración entre el Laboratorio de Físicoquímica Teórica ¹ y el Grains Lab ², pero principalmente a que estos sistemas son por sí mismos novedosos; presentan diversas aplicaciones potenciales desde un punto de vista académico y podrían ser fuente de conocimiento de la naturaleza. Por ejemplo, el impacto de cuerpos contra un conjunto de granos (partículas) que se tocan entre sí, conocidos éstos como medios granulares, ha sido bastante estudiado [2]; lo cual sirve, entre otras aplicaciones, para estudiar el impacto de los meteoritos contra los planetas. Aquí surgen inmediatamente preguntas como ¿qué sucedería si las partículas del medio granular no se pudieran tocar?, ¿la dinámica de los procesos sería la misma? Se sabe también que en un silo (o contenedor) lleno de granos, las paredes pueden romperse, en alturas intermedias del silo, debido a que el peso de los granos lo soportan las paredes laterales y no el fondo del silo, como ingenuamente se intuiría. En este sentido ¿el soporte del peso en un sistema de partículas que se repelen entre sí está dado de la misma manera que si las partículas no se repelieran? El desarrollo del *software* sobre el que se trabaja en este proyecto de tesis nos servirá para despejar estas preguntas y otras de características similares. Más aún, en este proyecto estudiaremos algunos aspectos específicos que son consecuencia de la repulsión entre partículas de un sistema bidimensional.

El desarrollo del presente trabajo de tesis se inicia con un código preexistente capaz de simular sistemas granulares en el cual las partículas no se repelen entre sí (llamaremos a estos sistemas sistemas granulares estándar). En este proyecto se proponen e implementan

¹Laboratorio de Físicoquímica Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

²Laboratorio de Materiales Granulares (Grains Lab), Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

algunas fuerzas que se espera sean suficientes para incluir todo lo relacionado con la repulsión, la cual es de origen magnético, como se describirá más adelante. Posteriormente se valida que las fuerzas sean adecuadas mediante la comparación con resultados experimentales [1]. Para esto último, se requirió implementar varias herramientas de análisis de datos los cuales se obtienen de las simulaciones y también se efectúa un análisis que, en sistemas granulares repulsivos, sólo es posible realizar mediante simulaciones. Finalmente, también confirmamos y validamos algunas leyes fenomenológicas que surgieron del estudio experimental de la materia granular repulsiva.

Antecedentes

La física de la materia granular se encarga de estudiar los fenómenos que se observan cuando en un sistema, compuesto de un gran número partículas de tamaño macroscópico (desde unos cuantos milímetros hasta unos metros de diámetro), éstas interactúan por la acción de la fuerza de fricción.

Un sistema granular es un conjunto de objetos (granos, partículas, etc.) macroscópicos que se caracteriza por perder energía cada vez que las partículas interactúan y por recuperar su forma original [3], un ejemplo común de la fuerza preponderante en el sistema granular es la fuerza de fricción, debido a esto el sistema disipa la energía cinética de las partículas, como consecuencia de los choques inelásticos entre ellas.

Cuando las partículas que componen al sistema granular sufren estímulos externos [3, 4], el comportamiento de los sistemas granulares se parece al de los gases, líquidos y sólidos. Es decir, dependiendo de las condiciones a las que se someta el sistema, éste se puede comportar de forma parecida a como lo hace un gas, un líquido o un sólido. Pero no sólo esto. Dado que las partículas que componen al sistema pueden tener cada una otras propiedades, como el momento magnético, o bien estar compuestas de materiales con alguna susceptibilidad magnética o eléctrica, el comportamiento del sistema granular varía con respecto a las propiedades de las partículas, y esto lo hace impredecible.

En general los sistemas granulares, tales como los granos, las semillas, las pastillas, la grava, la arena, etc., son bastante usados por el hombre, debido a la abundancia de éstos en nuestro alrededor (véase Fig. 1.1).



(a)



(b)



(c)

Figura 1.1: Ejemplos de materia granular.

Un ejemplo interesante de los sistemas granulares se encuentra en los anillos que rodean al planeta Saturno, compuestos por miles de rocas, donde las rocas son de diversos tamaños (Fig. 1.1.b).

1.1 Historia de la materia granular

El estudio de fenómenos relacionados con conjuntos de partículas macroscópicas sólidas sujetas a una fuerza de fricción que actúa entre ellas se inició desde tiempos antiguos, aunque el estudio de estos fenómenos no recibió la misma atención que otras áreas de la física. Se tiene registro de que en el año 55 d.C., el poeta y filósofo romano Lucrecio escribió: “Uno puede recoger semillas de amapola con una cuchara con la misma facilidad que si se

tratara de agua y, al inclinar la cuchara, éstas fluyen de forma continua" [4]. Esto es evidencia de que los fenómenos relacionados con un conjunto de partículas siempre han estado presentes en nuestro alrededor, aunque no se les haya otorgado la importancia debida en la antigüedad. En la época del Renacimiento, Leonardo da Vinci realizó experimentos para demostrar las leyes de la fricción en seco en bloques rectangulares de arena. Se ganó su lugar en la historia por sus observaciones e inquietudes del mundo que le rodeaba, proponiendo los primeros experimentos en muchas áreas de interés, particularmente aquí, por su interés en el comportamiento de las pilas de arena. Leonardo observó que un conjunto de arena no posee las mismas propiedades que un gas, un líquido o un sólido. Él observó que, comparando con un líquido, que toma la forma de su contenedor, o de un gas, que ocupa el volumen donde se confina, la arena formaba montículos (pilas), pero no solo esto sino que si el contenedor se movía, la arena se podía compactar y los montículos desaparecían. Estas observaciones dieron inicio a sus experimentos.

A finales del siglo XVIII, Charles de Coulomb escribió un ensayo en el que exponía las observaciones y experimentos de estructuras compuestas por rocas y el equilibrio de terraplenes (tierra con la que se rellena un terreno para levantar su nivel y formar un plano de apoyo). Con las aportaciones del ensayo se propusieron los primeros modelos de fricción en seco entre sólidos, conocida comúnmente como fricción de Coulomb [5]. Esto abrió paso a la física de materiales granulares como se conoce hoy día.

Posteriormente, Ernst Chladni utilizó sistemas granulares colocados sobre placas metálicas para estudiar los modos de vibración (patrones característicos con los que vibrará un sistema mecánico) de dichas placas. De su trabajo se descubrió lo que hoy se conoce como figuras sonoras de Chladni [6]. Dichas placas forman patrones con un medio granular sobre una superficie plana vibrando en un modo propio y con estos patrones se pueden visualizar las ondas sonoras sobre un material (véase Fig. 1.2). Cuando la placa vibra, el medio granular tiende a desplazarse por efecto gravitatorio desde las zonas de máxima vibración, a las zonas de vibración nula, pudiéndose visualizar los nodos (puntos de un cuerpo vibrante que no se mueven) en ella.

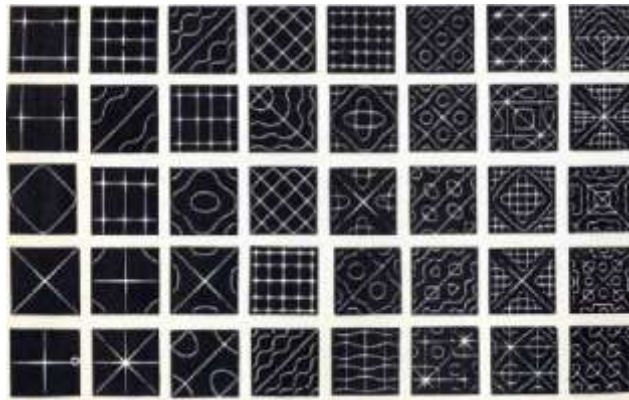


Figura 1.2: Figuras sonoras de Chladni.

Los patrones que se muestran en la figura 1.2 se producen a diferentes frecuencias de vibración, en la misma placa metálica y con el mismo tipo de grano.

Michael Faraday describió el apilamiento de una capa de arena cuando se agitaba verticalmente por una membrana elástica. Él observó que los sistemas granulares tienden a compactarse y deformarse (cambiar su amontonamiento inicial), de manera que los sistemas granulares son inestables cuando se someten a vibraciones [7]. William Rankine estudió la fricción en materiales granulares y, basándose en los trabajos de Coulomb, estableció los estados activos y pasivos de Rankine. El estado activo ocurre cuando existe una relajación en la masa de suelo que le permite moverse hacia fuera del espacio que lo limita. Ésta es la presión mínima a la que el suelo puede someterse para que no se rompa. Por otro lado, el estado pasivo ocurre cuando la masa de suelo está sometida a una fuerza externa que lleva al suelo a la tensión límite de confinamiento. Esta es la máxima presión a la que puede ser sometido un suelo en el plano horizontal [8].

Diversos investigadores estudiaron el equilibrio y la distribución de las fuerzas en sistemas granulares confinados. Un sistema granular se encuentra en reposo cuando la suma vectorial de las fuerzas que actúan sobre él y sobre cada una de las partículas que lo componen es igual a cero. Cuando esto ocurre, el sistema granular tiene un comportamiento semejante a un sólido. Aunque dicho comportamiento suele perderse fácilmente con sólo aplicar una fuerza pequeña sobre el sistema granular.

El equilibrio de un sistema granular depende de la forma y el tamaño de las partículas (objetos, granos, etc.) que lo componen, además del equilibrio y distribución del esfuerzo (fuerza que ejerce una partícula sobre otra en una dirección) de las partículas, dicho de otra forma, la fuerza se transmite desde una partícula a sus vecinas, generando una distribución que se conoce como cadena de fuerzas o cadena de esfuerzos (Fig. 1.3).

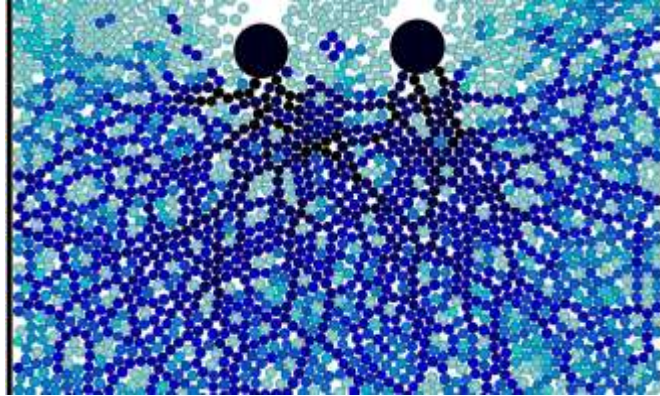


Figura 1.3: Cadena de fuerzas en materia granular estándar, los colores en la figura dependen de la fuerza de fricción, cuanto mayor es la fuerza, más oscuro es el color.

En los sistemas granulares estándares el patrón de la distribución de esfuerzo se produce cuando una partícula está sujeta por las partículas de abajo de ella y por las de sus lados, de esta forma evita caer, a su vez las partículas que se encuentran más abajo sostendrán a las de arriba y así sucesivamente hasta alcanzar las paredes o el fondo del contenedor, como se observa en la Fig. 1.3.

En los sistemas granulares se pueden representar experimentalmente los patrones de las cadenas de fuerzas, por ejemplo mediante la fotoelasticidad [9]. Aunque esta técnica nos da un análisis cualitativo visible de los esfuerzos, no es una técnica que se pueda aplicar a cualquier sistema granular, ya que el medio granular debe tener propiedades fotoelásticas [10]. Por otro lado, teóricamente se pueden obtener patrones de las cadenas de esfuerzos mediante simulaciones, que es la vía dominante en este tipo de análisis [11–14]. Debido a la existencia de fuerzas inter-partícula y de una distribución de esfuerzos en sistemas granulares, se pueden determinar algunas propiedades macroscópicas del sistema, que tienen consecuencias muy importantes en fenómenos de transporte, como conducción de calor,

propagación de sonido y conducción eléctrica [15–18]. Un ejemplo de fenómenos de transporte en sistemas granulares se observa en los polvos metálicos donde se estudia la conducción eléctrica y se determina el efecto Blandy (caída drástica de la resistencia eléctrica de una muestra de granos metálicos por efecto de las ondas electromagnéticas generadas por una chispa eléctrica producida a una determinada distancia) [19].

I. Roberts estudió la dependencia de la presión de los granos contra las paredes de un contenedor [20]. H. Janssen describió cómo varía la presión con la altura del sistema granular y cómo cambia la dirección hacia las paredes del contenedor [21, 22].

A finales del siglo XIX, Osborne Reynolds aportó contribuciones fundamentales a la teoría granular [23]. Una de las más importantes fue introducir la idea de la dilatancia (propiedad de los materiales utilizada para describir el incremento en volumen frente a un esfuerzo de corte) del sistema granular.

Debido a que los sistemas granulares tienen un comportamiento diverso y dependiendo de las condiciones a las que se sometan los sistemas, éstos pueden tener un comportamiento impredecible, de ahí que el interés en estudiar sistemas granulares y su comportamiento haya ido en aumento. Como consecuencia, el número de científicos dedicados al estudio de sistemas granulares también aumentó en el transcurso del siglo XX y hasta la fecha.

1.2 Impacto de la materia granular

Durante muchos años, el estudio de materia granular fue dominio de los ingenieros químicos y mecánicos, los físicos iniciaron su interés recientemente. A partir del momento en el que la física de la materia granular se consolidó como un área de estudio, hubo un mayor interés sobre el entendimiento y el comportamiento de los sistemas granulares.

Los sistemas granulares se encuentran en nuestro alrededor de forma abundante y se emplean en diversas áreas, tal como la ingeniería, la minería, la agricultura, la física y otras más [24]. Algunos ejemplos del uso de los sistemas granulares se encuentran en las construcciones. Los materiales que utilizan en ingeniería civil en su mayoría son sistemas granulares, empleados para construir carreteras, edificios y estructuras más complejas. Pero no sólo eso,

también los avances con respecto al comportamiento de los sistemas granulares se han aplicado en diseños de contenedores para almacenar granos [25], donde la importancia de la distribución de fuerzas dentro del silo, la forma y la altura de éste son determinantes para garantizar que el silo soportará su contenido. Por otra parte, estudiar sistemas granulares confinados en contenedores es importante para saber cuál será su comportamiento en determinadas condiciones de almacenaje [26]; también es importante determinar las propiedades del sistema dentro del contenedor y en los procesos de descarga. Dado que los sistemas granulares presentan un comportamiento particular cuando el sistema se mueve por acción de la fuerza de gravedad y pasa a través de un orificio (por ejemplo al descargar un silo o un reloj de arena), se genera un flujo de partículas que, dependiendo de su tamaño y forma, puede ser continuo o interrumpirse por atascamientos [27, 28]. Las descargas de silos constituyen un proceso importante en muchas disciplinas y durante éste se forman arcos en las salidas de dichos silos [29]. Los sistemas granulares se mantienen en reposo de acuerdo a la primera ley de Newton. Cuando un sistema granular se encuentra en reposo y se ejerce suficiente presión sobre él, se forman arcos asociados a los patrones de las cadenas de fuerzas (véase Fig. 1.4). Estos arcos también se pueden formar mientras se descarga un silo, pero sólo aquellos que son estables pueden soportar el peso de las partículas que están por encima de dicha conformación. La vida media de dicho arco dependerá de la estabilidad de las cadenas de fuerzas.

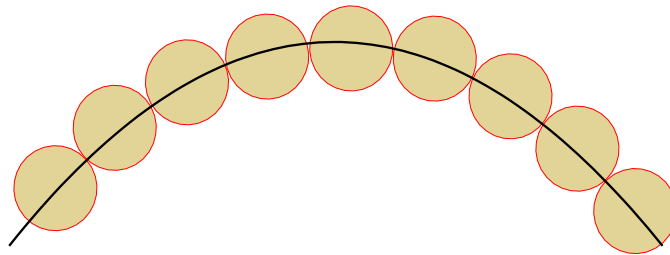


Figura 1.4: Arco formado por la fuerza de fricción.

La formación de arcos en la salida de un silo es un problema común en la industria, la minería y otras áreas, debido a que, por la formación de arcos estables en la salida de un silo, el flujo a través de dicha salida se interrumpe, lo cual genera atascamientos, líneas de

producción con retrasos y otra serie de problemas.

Otros ejemplos de la importancia de los sistemas granulares se observan en el estudio de la estabilidad de un medio granular en condiciones específicas para analizar deslaves [30], en la descripción del comportamiento cuando se intenta penetrar en un sistema granular [13, 31, 32] y no sólo ello, en general estudiar las propiedades de los sistemas granulares en condiciones específicas es de gran interés [3, 33–36].

Los sistemas granulares no sólo se han analizado de manera experimental, sino que se ha incorporado el uso de simulaciones para complementar su estudio. Con la aplicación de simulaciones en el estudio de sistemas granulares se han generado modelos matemáticos y se han creado programas computacionales para conocer mejor el comportamiento del sistema en diversas condiciones. Además, las simulaciones nos ayudan a obtener una mayor información de los sistemas granulares, es mucho más sencillo realizar múltiples experimentos y no hay que construir un sistema físico.

La materia granular estándar se ha estudiado de forma exhaustiva, y gracias a las propuestas matemáticas que describen un comportamiento en específico se han podido describir los comportamientos colectivos, aunque muchas veces para determinar la naturaleza del comportamiento colectivo de los sistemas granulares no se alcanza un consenso, por lo que se recurre a estudios teóricos por medio de simulaciones, debido a sus ventajas antes mencionadas. En las referencias [37–45] se encuentran algunos ejemplos del uso de simulaciones para estudiar sistemas granulares.

1.3 Motivación

En el contexto anterior, este trabajo de tesis se plantea contribuir al desarrollo de *software* de simulación de materia granular en dos dimensiones. Como se comentó anteriormente, ya se cuenta con un código pre-existente capaz de simular algunos sistemas de materia granular estándar, y en este trabajo se continúa con el desarrollo para que el programa pueda simular materia granular repulsiva.

Ahora bien, para desarrollar un programa de cómputo científico, no basta con ingresar lí-

neas de código en algún lenguaje de programación, sino que es absolutamente necesario verificar que los modelos matemáticos describan adecuadamente el sistema. En nuestro caso, esta verificación se realiza mediante la comparación entre lo experimental y lo simulado del comportamiento colectivo del sistema. En particular, se pueden medir algunas propiedades de carácter estadístico; veremos y compararemos varias de éstas a lo largo del trabajo, pero en general podemos decir que serán propiedades dinámicas (velocidades, cadenas de fuerza, flujo a través de un orificio) y estáticas (densidad promedio), y que se medirán no en una única simulación sino en un ensamble pequeño de sistemas.

1.4 Objetivo general

- Desarrollar, habilitar y validar un *software* científico de dinámica molecular 2D (DEMDySiGMA) para estudiar Sistemas Granulares Repulsivos.

1.5 Objetivos particulares

- Incorporar las fuerzas necesarias en el programa DEMDySiGMA para capturar los efectos globales de la repulsión magnética entre discos.
- Determinar los valores de los parámetros físicos necesarios para que las simulaciones reproduzcan observaciones experimentales globales.
- Simular la descarga de un silo bidimensional inicialmente lleno de materia granular repulsiva.
- Implementar los programas necesarios para realizar el análisis numérico de las simulaciones.
- Reproducir el comportamiento observado experimentalmente acerca del flujo de granos repulsivos que sucede en la descarga del silo como función del tamaño del orificio de descarga.

- Comparar la estructura de las cadenas de fuerza presentes en un silo lleno de materia granular estándar vs otro lleno de materia granular repulsiva.

Fundamentos teóricos

2.1 Descripción del sistema experimental original

El sistema experimental [1] realizado por el Grains Lab es la descarga de un silo bidimensional lleno con discos que poseen momentos magnéticos permanentes (imanes). Durante el llenado del silo se aseguran que los momentos magnéticos de los discos permanezcan paralelos y se restringe el movimiento a dos dimensiones por medio de una celda tipo Helshaw (la descripción de ésta se encuentra en el apéndice A). La celda impide la rotación completa del disco, haciendo que la configuración repulsiva se mantenga siempre.

Como el sistema se encuentra bajo la acción de la gravedad, además de otras fuerzas, cuando se abre el silo, los granos que se encuentran dentro de él empiezan a fluir. Se mide el flujo en el proceso de descarga a diferentes tamaños de orificio. El llenado del silo se hace con un conjunto de 565 discos magnéticos de un grosor de 3.00 ± 0.02 mm, un diámetro de 5.00 ± 0.02 mm, una masa de 0.4 g y un campo magnético superficial de 5.9 kG, ésta propiedad no es relevante en las simulaciones, ya que el programa necesita el momento magnético para calcular la repulsión entre dos imanes (véase sección 2.3.1).

El contenedor tiene paredes frontales de vidrio que se encuentran separadas ligeramente, a una distancia de 3.10 ± 0.05 mm. Las paredes del fondo del silo donde se encuentra el orificio de salida (D) no son repulsivas. Por otra parte, las paredes laterales son repulsivas,

éstas se construyeron con barras magnéticas. Por lo tanto también existe repulsión entre las paredes laterales y los discos.

En la figura 2.1 se muestra el silo experimental; como se observa las partículas no se tocan entre sí, ni tocan las paredes laterales.

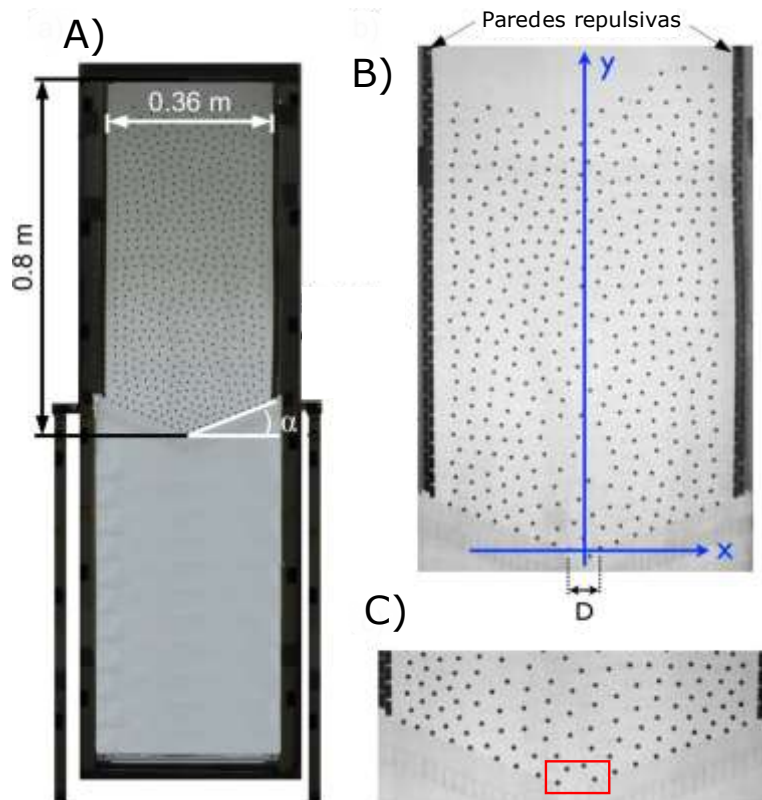


Figura 2.1: A) y B) Imágenes del silo experimental bidimensional lleno con materia granular repulsiva. C) Arco magnético observado en orificios pequeños.

En los silos, el proceso de descarga genera un flujo de materia a través del orificio en la salida del contenedor [46]. Una pregunta natural consiste en comprobar si el flujo del experimento se comporta igual que en un silo normal (donde el contenido mantiene contacto).

Los sistemas granulares con propiedades magnéticas se han estudiado antes [47–49], sin embargo, no con gran detalle en comparación de los sistemas granulares estándares, y en la literatura no hay un estudio similar al sistema granular repulsivo experimental. Este sistema podría ser un modelo para comparar el comportamiento de automóviles, multitudes y animales [1].

En el presente trabajo se realizan simulaciones e implementaciones para calibrar el programa DEMDySiGMa (véase sección 2.4 y 2.3.1) con los datos experimentales obtenidos por el Grains Lab.

2.2 Comportamiento del flujo de materia granular

2.2.1 Flujo granular

Durante decadas se ha estudiado ampliamente el flujo granular; una ley aceptada para predecir el flujo a través de un orificio es la ley de Beverloo [46]. Sin embargo estudios posteriores al trabajo de Beverloo han modificado la ecuación que él propuso con el fin de mejorar la predicción del flujo a través de un orificio.

El flujo, en general, se define como la materia que pasa a través de una región por unidad de tiempo. Considerando esto, se determina la ecuación para predecir el flujo de masa a través de un orificio de diámetro D en la base de un silo. El flujo toma la forma de la ecuación 2.1

$$Q = \langle \rho \rangle \langle \bar{v} \rangle D, \quad (2.1)$$

donde Q es el flujo, $\langle \rho \rangle$ es la densidad promedio en la salida del silo, $\langle \bar{v} \rangle$ es la velocidad promedio en la salida del silo y D es el tamaño del orificio en la salida del silo.

La relación del flujo en un silo bidimensional se deduce teniendo en cuenta dos premisas: (i) cuando el orificio de salida del silo es menor al umbral dado por kd , donde k es una constante empírica que depende del medio y d es el diámetro de las partículas, se bloquea el flujo (ii) al pasar a través del orificio, las partículas experimentan caída libre. El flujo se define por la ecuación 2.2.

$$Q = \langle \rho \rangle \sqrt{2g\beta D(D - kd)}. \quad (2.2)$$

En la ecuación 2.2, $\langle \rho \rangle$ es la densidad media de los granos en la salida del silo. La velocidad media en la salida del silo está determinada por la expresión $\sqrt{2g\beta D}$, cuando las partículas pasan a través del orificio de la salida; D es el diámetro del orificio en la salida del silo, β es

una constante de proporcionalidad del arco semicircular que se forma antes del orificio, d es el diámetro de las partículas y k una constante empírica que depende del medio.

Se ha demostrado que el flujo presenta atascamientos en sistemas (silos) cuyos orificios son pequeños ($D \leq kd$) [1, 29, 37, 50], debido a la formación de arcos. En el flujo de materia granular, estos arcos siempre existirán cuando el peso de las partículas se equilibren con la suma de las fuerzas de las partículas vecinas (Fig. 1.4).

En experimentos anteriores se ha demostrado que si las dimensiones del silo, el tamaño de las partículas y el diámetro del orificio en la salida del silo cumplen ciertas características geométricas, entonces el flujo es independiente al contenedor. También se sabe que la presión en el fondo de un silo es constante, sin importar la altura de la columna de partículas; siempre que ésta supere dos veces el ancho del silo [21, 51, 52], por esto, la presión no afecta el flujo en la descarga de un silo.

En estudios previos observaron que la densidad en la salida de un silo decae exponencialmente en función del tamaño del orificio de salida [28]. G. Lumay *et al.* proponen una versión modificada de la ley de Beverloo (véase Ec. 2.3) para un silo lleno de materia granular donde existen interacciones repulsivas entre las partículas [1]. También encontraron que los perfiles de densidad y de velocidad tienen un comportamiento similar entre sí en todos los intervalos de los tamaños de orificio. Además proponen que el flujo Q debe modificarse con un factor exponencial relativo con la baja densidad de la materia granular en la cercanía de la salida. La versión modificada de la Ley de Beverloo que proponen es:

$$Q = \frac{\Sigma}{\rho_{\infty} + \rho_0 - \rho_{\infty} e^{-\frac{\rho_0 \Sigma}{\sigma}}} - \frac{\Sigma}{2g\beta D D}, \quad (2.3)$$

donde $\frac{\Sigma}{2g\beta D}$ es la velocidad promedio de los granos en la salida del silo, usamos el valor de $\beta = 0.22$ obtenido experimentalmente y $\frac{\rho_0 \Sigma}{\sigma}$ es la densidad. Los valores

de las constantes necesarias en la densidad son: $\rho_0 = 4737 \pm 716$ granos/m², $\rho_{\infty} = 1343 \pm 29$ granos/m² y $\sigma = 0.029 \pm 0.004$ m.

La deducción y las consideraciones completas para llegar a la ecuación 2.2 y 2.3 están en el apéndice B.

2.3 Dinámica molecular

La dinámica molecular es una técnica computacional que permite determinar la evolución temporal de un conjunto de partículas mediante métodos numéricos y describir un sistema en el que las partículas (átomos, moléculas y objetos macroscópicos) interactúan entre sí.

Esta técnica se utiliza con frecuencia en el estudio de proteínas, biomoléculas y en ciencias de materiales (que es nuestro caso), con el propósito de entender mejor las propiedades de un sistema en términos de las interacciones entre sus componentes.

Para realizar una dinámica molecular, es necesario conocer las fuerzas que actúan sobre el sistema y utilizar un algoritmo numérico para resolver ecuaciones de movimiento de cada partícula del sistema, eligiendo normalmente las ecuaciones de Newton al aceptar una aproximación clásica del sistema.

La técnica de dinámica molecular, en general, consta de tres pasos importantes:

1. Construcción de un estado inicial.

En este paso se asignan los parámetros iniciales para la dinámica, tanto posiciones, como velocidades iniciales y la información de nuestro sistema, todos ellos necesarios para dar inicio a un cálculo numérico con esta técnica.

2. Simulación de dinámica molecular.

En este paso se calculan las fuerzas de cada partícula y se usa un algoritmo determinado para resolver ecuaciones diferenciales presentes en las expresiones de las fuerzas que rigen a un determinado sistema. Es decir, se resuelven las ecuaciones de Newton asociadas al movimiento como función del tiempo. También se registran las trayectorias (es la información acerca de cómo las posiciones y velocidades de las partículas en el sistema cambian con el transcurso del tiempo) para su análisis posterior.

3. Análisis de datos.

En este paso se realizan los cálculos de las propiedades que uno desea obtener, es decir, se procesa la información extraída de la dinámica molecular.

2.3.1 Fuerzas que describen al sistema

Las interacciones entre las partículas se modelan con un campo de fuerzas aproximado. En términos generales una simulación de dinámica molecular consiste en resolver las ecuaciones de Newton (Ec. 2.4) para cada una de las partículas del sistema como función discreta del tiempo, es decir,

$$\vec{F}_i(t_n) = m_i \ddot{\vec{x}}_i(t_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.4)$$

En la ecuación 2.4, t_n es el valor del tiempo en el cual se encuentra el sistema, \vec{F}_i es la fuerza total que actúa sobre la partícula i -ésima, m_i su masa y $\ddot{\vec{x}}_i$ la segunda derivada temporal del vector de posición. En general \vec{F}_i puede calcularse a través de la suma de todas las fuerzas presentes en el sistema, y ésta constituye el campo de fuerzas.

En nuestro sistema de interés, las fuerzas que pueden estar presentes son la fuerza de gravedad, fuerzas de repulsión entre dos dipolos magnéticos, la fuerzas de repulsión entre paredes del sistema (tanto frontales como laterales) con los discos y la fuerza entre los discos y las paredes repulsivas (véase Fig. 2.2). Es decir, \vec{F}_i está dada por:

$$\vec{F}_i = -m_i \vec{g} + \sum_{j \neq i}^{N_p} \vec{F}_{ij}^{dd} + \sum_a^{N_w} \vec{F}_{ia}^{pw} + \sum_{\beta=1}^{N_{rw}} \vec{F}_{i\beta}^{prw} + \vec{F}_i^W \quad (2.5)$$

donde $-m_i \vec{g}$ es la fuerza de gravedad, \vec{F}_i^W es la fuerza producida por la fricción con las paredes frontales, $\vec{F}_{i\beta}^{pw}$ es la fuerza de repulsión entre discos y paredes producida por choques inelásticos, $\vec{F}_{i\beta}^{prw}$ es la fuerza producida por la repulsión entre discos y paredes repulsivas, y \vec{F}_{ij}^{dd} es la fuerza de repulsión entre dos dipolos magnéticos [53], la cual está dada por:

$$\vec{F}_{ij}^{dd} = \frac{3\mu_0}{4\pi |\hat{x}_{ij}|^4} \left(\hat{x}_{ij} \times \vec{M}_i \right) \times \vec{M}_j + \left(\hat{x}_{ij} \times \vec{M}_j \right) \times \vec{M}_i - 2\hat{x}_{ij} \left(\vec{M}_i \cdot \vec{M}_j \right) + 5\hat{x}_{ij} \left(\hat{x}_{ij} \times \vec{M}_i \right) \cdot \left(\hat{x}_{ij} \times \vec{M}_j \right) \quad (2.6)$$

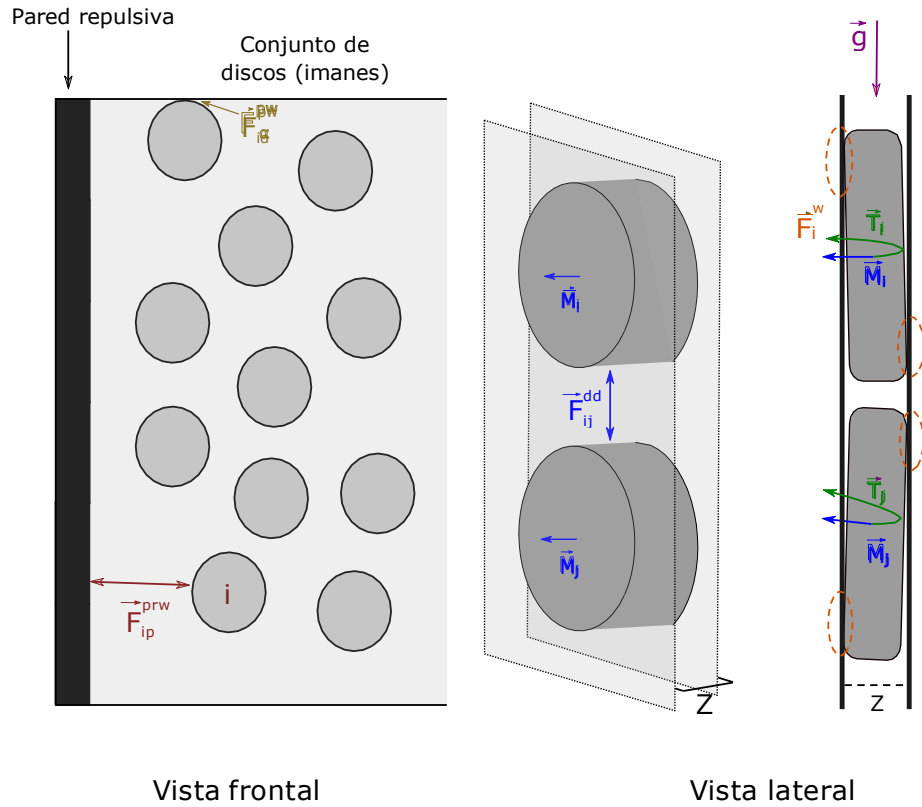


Figura 2.2: Fuerzas que actúan en la descarga del silo.

En la ecuación 2.6, \vec{M}_i es el momento magnético de la partícula i , μ_0 es la permeabilidad magnética en el vacío cuyo valor es $4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$, y $\vec{x}_{ij} = \vec{x}_j - \vec{x}_i$ es la distancia entre las partículas i y j . El ángulo formado por los momentos magnéticos entre las partículas i y j es cero (véase Fig. 2.2).

En nuestro sistema, se simulan los choques inelásticos mediante el efecto de una fuerza del tipo de resorte ideal cuya constante elástica de resorte reproduzca el coeficiente de restitución entre los materiales de los discos (acero) y las paredes (aluminio, cuando las paredes laterales no son repulsivas, v. sección 3.4). Las fuerzas de repulsión generadas por los choques inelásticos entre las partículas y las paredes son fuerzas implementadas anteriormente en un trabajo que se encuentra en la referencia [54].

La fuerza de repulsión entre discos y paredes repulsivas esencialmente es análoga a la fuerza de repulsión entre dos dipolos magnéticos de la ecuación 2.6, salvo que el vector $\vec{x}_{ij} = \vec{x}_j - \vec{x}_i$ es la distancia más corta entre el disco y un punto que se encuentra a lo largo de la

pared.

La fuerza entre los discos y las paredes frontales la calculamos mediante la siguiente expresión, que proponemos para este modelo matemático:

$$\vec{F}_i^W = \mu_{\text{eff}} \cdot \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}^{dd} \cdot \frac{-\vec{v}_i}{|\vec{v}_i|}, \quad (2.7)$$

donde μ_{eff} es un coeficiente de fricción efectivo (el cual es de hecho un parámetro ajustable en la simulación) y \vec{v}_i es la velocidad de la partícula i . La ecuación 2.7 representa la fuerza de fricción entre las paredes frontales y los discos. Se observa que la fricción es generada como la oposición al movimiento de las partículas, por esta razón la fuerza está en la dirección contraria a la velocidad de la partícula.

La evolución temporal de las partículas se realiza mediante la integración numérica de las ecuaciones de Newton (Ec. 2.4), y la dinámica molecular permite saber el estado del sistema al tiempo t_{n+1} si se conoce al tiempo t_n . Al integrar las ecuaciones de Newton consecutivamente (es decir, incrementando el valor del índice n) podemos encontrar cómo evoluciona el sistema en función del tiempo de simulación.

2.3.2 Algoritmo velocity Verlet

Existen varias opciones para resolver ecuaciones diferenciales de forma numérica, entre estas opciones se hallan los métodos de Euler, Runge-Kutta, Störmer–Verlet, integración simple de Verlet, velocity Verlet, entre otros [55].

En nuestro caso utilizamos el algoritmo velocity Verlet, debido a que este algoritmo nos brinda una precisión equivalente a métodos como Runge-Kutta de segundo orden (RK2), con la ventaja que velocity Verlet es más sencillo de programar, lo que lo hace ideal para la implementación de simulaciones; además este algoritmo se utiliza comúnmente en el cálculo de trayectorias de un conjunto de cuerpos, como en nuestro caso con materia granular. Con este algoritmo se predice la posición y la velocidad en un instante de tiempo (t_{n+1}) si se conoce la posición y la velocidad en un tiempo (t_n). El valor de Δt es de 3.2894×10^{-6} s y el error global

del método es $O(\Delta t^2)$. Las ecuaciones que se utilizan en este algoritmo son las siguientes:

$$\bar{x}(t_{n+1}) = \bar{x}(t_n) + \bar{v}(t_n)\Delta t + \frac{1}{2}\bar{a}(t_n)\Delta t^2, (2.8)$$

$$\bar{v}(t_{n+1}) = \bar{v}(t_n) + \frac{\bar{a}(t_n) + \bar{a}(t_{n+1})}{2}\Delta t. (2.9)$$

El esquema del algoritmo es:

1. Calcular: $\bar{v}(t_{n+\frac{1}{2}}) = \bar{v}(t_n) + \frac{1}{2}\bar{a}(t_n)\Delta t$.
2. Calcular: $\bar{x}(t_{n+\frac{1}{2}}) = \bar{x}(t_n) + \bar{v}(t_{n+\frac{1}{2}})\Delta t$.
3. Obtener: $\bar{a}(t_{n+1})$.
4. Calcular: $\bar{v}(t_{n+1}) = \bar{v}(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}\bar{a}(t_{n+1})\Delta t$.

Eliminando los pasos intermedios de la velocidad, el algoritmo se acorta como sigue:

1. Calcular: $\bar{x}(t_{n+1}) = \bar{x}(t_n) + \bar{v}(t_n)\Delta t + \frac{1}{2}\bar{a}(t_n)\Delta t^2$.
2. Obtener: $\bar{a}(t_{n+1})$.
3. Calcular: $\bar{v}(t_{n+1}) = \bar{v}(t_n) + \frac{1}{2}(\bar{a}(t_n) + \bar{a}(t_{n+1}))\Delta t$.

De esta manera podemos estudiar la trayectoria de las partículas en nuestro sistema, realizando un número determinado de repeticiones del esquema anterior.

2.4 El programa DEMDySiGMa

El programa DEMDySiGMa (*Discrete Element Molecular Dynamics Simulator for Granular Materials*) está conformado por un grupo de subprogramas tales que en conjunto realizan simulaciones de materiales granulares (Fig. 2.3).

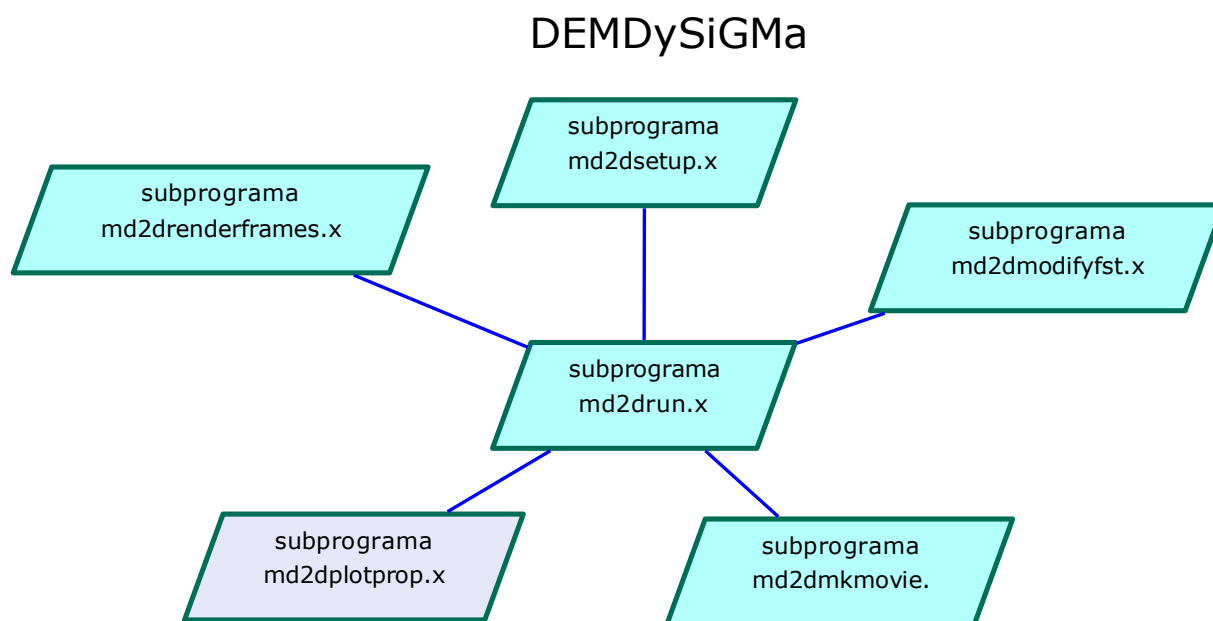


Figura 2.3: Programa DEMDySiGMa

DEMDySiGMa utiliza la dinámica molecular de elemento discreto para simular las fuerzas de contacto (choques inelásticos) de larga duración, y es capaz de simular también las fuerzas descritas en la sección 2.3.1.

En el programa se tiene la libertad de elegir condiciones del sistema, en las se pueden activar o desactivar las fuerzas, modificar el número de paredes y el tipo (repulsivas o no), modificar las posiciones de las paredes (esto da la opción de construir un sinfín de sistemas), entre otras opciones más.

Como se mencionó en la sección 1.3, el programa DEMDySiGMa contaba con un código previo, en éste hicimos modificaciones e implementaciones para obtener un programa más robusto. Las modificaciones las realizamos en todos los subprogramas del código para habilitar las nuevas opciones y las condiciones del sistema repulsivo, principalmente imple-

mentamos un subprograma para el cálculo de las propiedades, éste recibe el nombre de `md2dplotprop.x` (véase la Fig. 2.3 color morado). Las propiedades que se pueden determinar son: la densidad, la velocidad promedio, la magnitud de velocidad, la fracción de partículas liberadas, el área máxima ocupada por las partículas, entre otras. Determinar las propiedades es un ventaja debido a que se pueden procesar los datos de las trayectorias obtenidas de la simulación y de esta manera obtener información de nuestro sistema.

Este conjunto de subprogramas están escritos en lenguaje C++, funcionan en el sistema operativo Linux (compilador `g++`) y MacOSX (compilador `g++-mp-4.9`). Una vez que el programa alcance una versión aceptable, se liberará al público bajo alguna licencia Open-Source.

2.5 Metodología

En la figura 2.4 se muestran los pasos generales que se deben seguir en el uso del programa DEMDySiGMA. A continuación explicamos el flujo con más detalle.

En primer lugar se crea el archivo `fileName.stp` que contiene toda la información necesaria para utilizar DEMDySiGMA. Con este archivo se construye el sistema, por lo tanto es el archivo inicial y de configuración en el programa. La información que contiene se puede separar en cuatro partes. Primera, la información para dar inicio a la dinámica como el tiempo inicial y final. Segunda, la información de las partículas como el número, el tipo, la densidad, el radio y el grosor, etc. Con toda esta información se crean las animaciones e imágenes que se realizan de las simulaciones. Tercera, la información del contenedor, como el número de paredes y el tipo. Cuarta, la información de las fuerzas que se consideran en el cálculo, como el uso de la fuerza de gravedad, la fuerza de repulsión dipolo dipolo, el momento magnético, el coeficiente de fricción, etc.

Con el subprograma `md2dsetup.x` y el archivo `fileName.stp` se genera un nuevo archivo (`fileName.in`) que contiene las posiciones y las velocidades iniciales de nuestro sistema, las cuales genera de forma aleatoria `md2dsetup.x`. Posteriormente, con el archivo `fileName.in` y el subprograma `md2drun.x`, se inicia la dinámica molecular, que da como resultado dos archivos.

El primer archivo, de extensión `fst`, contiene la información del último paso de tiempo, es decir, contiene las posiciones, velocidades y fuerzas de todas las partículas en el tiempo t_n .

El segundo archivo, de extensión `trj`, contiene las posiciones, velocidades y fuerzas determinadas por medio de las ecuaciones presentes en la sección 2.3 muestreados en varios t_n . Este archivo contiene toda la información de las trayectorias a lo largo del tiempo de simulación.

En la figura 2.4 se muestra que para continuar con el flujo de trabajo existen dos opciones después de usar `md2drun.x`. En la sección 2.3 se mencionó que la técnica de dinámica molecular se componía en tres pasos generales: la creación de un estado inicial, la simulación de dinámica molecular y el análisis de datos.

En la práctica, el estado inicial con el que se realiza la dinámica molecular no siempre es el estado previo al que se desea analizar, por lo cual es importante llevar nuestro sistema al estado que se desea, por medio de una secuencia entre la salida de la dinámica molecular donde ya se han modificado las posiciones y velocidades como para generar otro estado "inicial" diferente. Se realiza esta secuencia las veces que se necesiten. Después de obtener un estado análogo al experimental, se realiza una última dinámica molecular, de la cual se analizan las trayectorias de las partículas que están guardadas en el archivo `fileName.trj`. Con la información de las trayectorias se pueden utilizar tres subprogramas, de los cuales se obtienen diferentes resultados. El primero se obtiene al analizar el archivo `fileName.trj` con el subprograma `md2dplotprop.x` y calcular algunas propiedades del sistema como la densidad, la velocidad, el número de partículas que salen del contenedor, entre otras. El segundo resultado es una animación (vídeo) que se realiza con el subprograma `md2dmkmovie.x`. La animación sirve para observar el movimiento de las partículas a lo largo del tiempo de la simulación. El tercer resultado es un conjunto de imágenes en un determinado tiempo de simulación que se realiza con ayuda del subprograma `md2drenderframes.x`.

Estos resultados servirán para explicar mejor la evolución temporal de distintas propiedades del sistema, lo cual aportará información adicional a lo que se puede obtener experimentalmente.

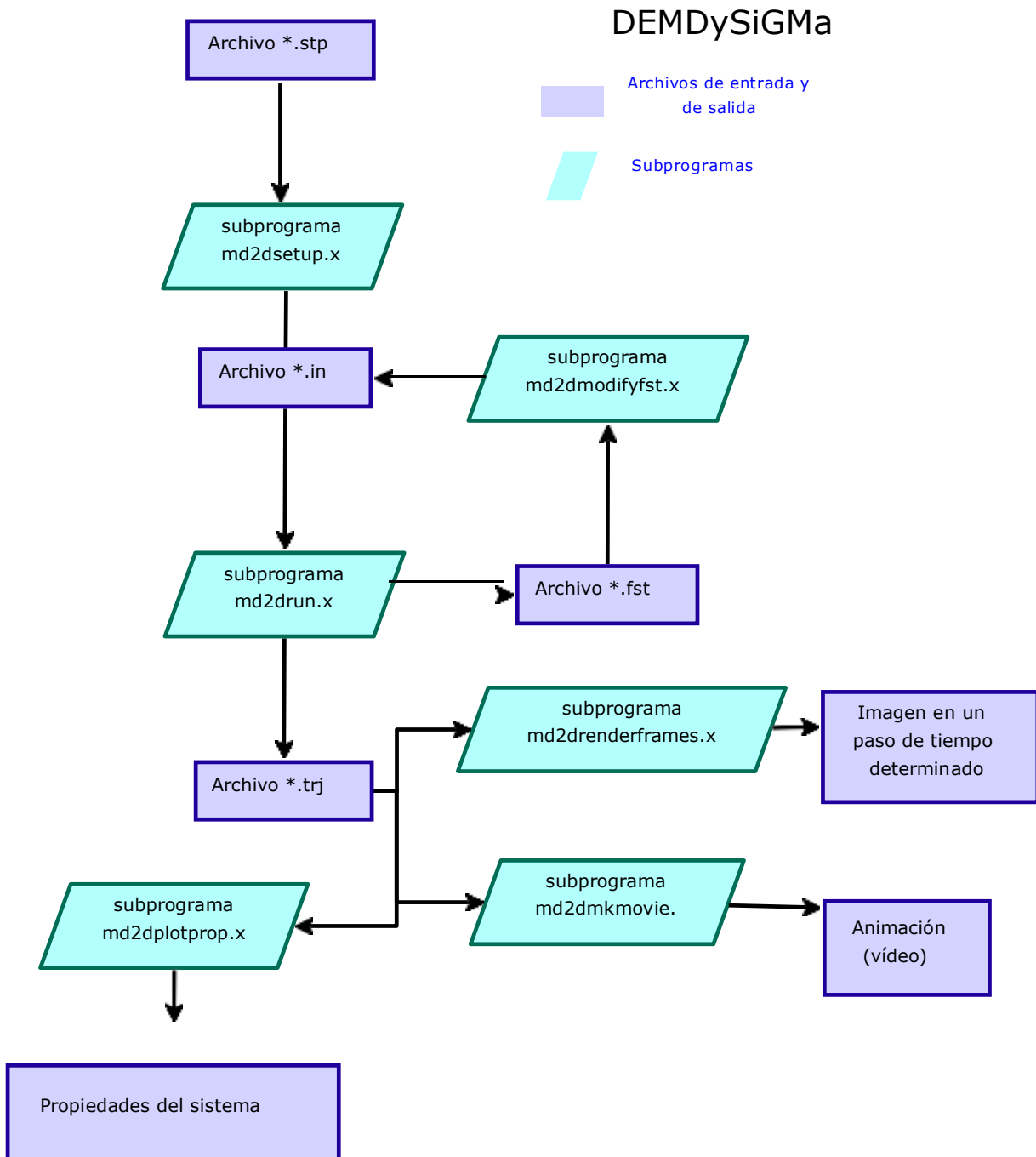


Figura 2.4: Flujo de trabajo con los subprogramas que componen DEMDySiGMa.

Resultados y discusión

La implementación de un programa de análisis numérico se realiza en muchos pasos y de forma iterativa. Uno de los pasos más importantes es validar numéricamente el programa. En este proceso se realiza una serie de simulaciones para comprobar si las implementaciones y los modelos que se proponen en el programa describen adecuadamente un experimento de referencia.

Para calibrar DEMDySiGMA, comparamos simulaciones generadas por el programa con los datos experimentales del grupo de investigación de materiales granulares del Instituto de Física (Grains Lab) de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Los datos experimentales se reportaron en el artículo de G. Lumay y colaboradores [1].

Para realizar las simulaciones que presentamos en este trabajo fue necesario determinar los parámetros empíricos, imprescindibles en las expresiones matemáticas con las que describimos las fuerzas que rigen nuestro sistema. El primer parámetro que se necesita es el momento magnético (M) que posee cada una de las partículas del sistema. El segundo parámetro es el coeficiente de fricción efectivo (μ_{eff}) asociado al rozamiento que se genera entre las paredes frontales del sistema y las partículas (véase Fig. 2.2). Estos dos parámetros se usan al describir la ecuación 2.5 de las fuerzas que actúan en todo el sistema. De manera explícita se observa el papel que desempeñan estos parámetros en las ecuaciones 2.6 y 2.7.

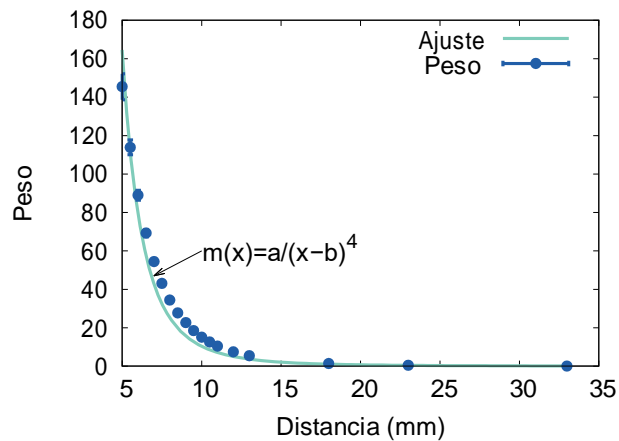
3.1 Cálculo del momento magnético

El primer parámetro se obtiene por medio de un experimento, es decir, el momento magnético (necesario en la Ec. 2.6), en el que se mide la fuerza de repulsión que existe entre dos imanes como función de la distancia.

Para conocer el valor del momento magnético realizamos el experimento con una balanza en la cual fijamos un placa de acrílico y en ésta adherimos un imán, de las mismas características de los imanes que utilizan en el llenado del silo. Por otro lado, adherimos un segundo imán en la base de un picómetro que está fijo a un soporte vertical. Alineamos el imán de la balanza y el del soporte vertical. Una vez alineados los imanes, los acercamos y registramos la variación del peso. Ajustamos la tendencia del peso con la ecuación $\frac{a}{(x-b)^4}$, como se muestra en la figura 3.1.b. Por medio de álgebra obtenemos el valor del momento magnético que corresponde a $M = 0.046827 \text{ A m}^2$, este valor lo utilizamos en todas las simulaciones. Los detalles para obtener el momento magnético están en el apéndice C.



(a)



(b)

Figura 3.1: **a)** Fotografía del experimento. Esquema para obtener el momento magnético entre dos imanes. **b)** El peso en función de la distancia. Los puntos son los datos experimentales con barras de error, la línea continua representa ajuste con la ecuación $a/(x - b)^4$.

3.2 Cálculo de propiedades

En este trabajo realizamos mejoras y nuevas implementaciones sobre el código que ya existía. La contribución más importante fue crear un subprograma para determinar propiedades de un sistema granular. Las propiedades calculadas con el programa DEMDySiGMA que se comparan con los datos experimentales son las siguientes:

Cálculo de la densidad en la salida del silo. En general la densidad en un sistema granular bidimensional se calcula como el cociente del número de partículas entre unidad de área.

Para este trabajo particularizamos el cálculo de la densidad en el área de salida. En la figura 3.2 se muestra el esquema que describe la caja imaginaria que se usa en el conteo de las partículas para calcular la densidad en la salida del silo. La caja imaginaria que delimita el área en la que se desea calcular la densidad tiene la dimensión de $D \times 10d$ (el diámetro del orificio por diez veces el diámetro de las partículas).

Para contar las partículas, que se encuentran dentro de la caja que definimos, usamos como criterio la posición del centro de masas de cada partícula, que debe estar dentro de los límites de la caja para ser contada y así contribuya con la densidad.

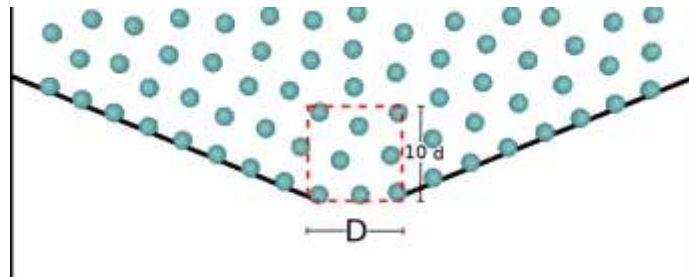


Figura 3.2: Esquema de la caja imaginaria que se usa en el conteo de partículas.

La densidad tiene unidades de partículas por unidad de área. En el cálculo de la densidad, la caja imaginaria se puede situar donde se desee dentro del sistema y con la dimensión que se requiera.

Cálculo de la velocidad promedio en la salida del silo. Realizamos el cálculo de la velocidad promedio bajo el mismo esquema que en la densidad; se usa la misma dimensión de la caja en la salida del silo (véase Fig. 3.2). Calculamos la velocidad promedio de las partículas que se encuentran en el área de la caja. Las partículas cuyos centros de masa se encuentran dentro del límite de la caja son tomadas en cuenta en el promedio de la velocidad. La caja se puede situar y dimensionar como se requiera.

Cálculo de las partículas liberadas. En esta propiedad se toma en cuenta el número de partículas que salen del silo en función del tiempo.

En el cálculo de esta propiedad colocamos una línea de referencia en el límite de la salida del silo (véase la Fig. 3.3), cuando el centro de masa de la partícula pasa la línea límite, entonces la partícula es contada, de esta manera sabemos el número de partículas que salen del silo en función del tiempo. La línea de referencia se puede colocar en el lugar que se desea para contar las partículas que la pasan.

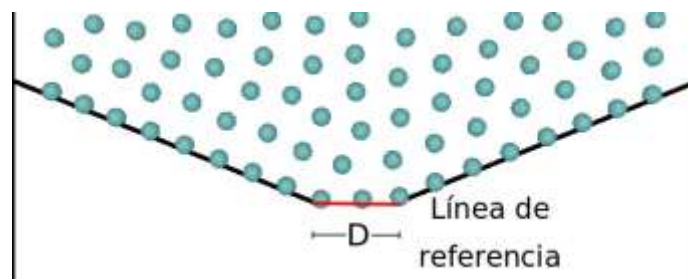


Figura 3.3: Esquema de la línea de referencia que se usa en el conteo del número de partículas liberadas en la descarga del silo.

Cálculo del flujo. El flujo en cada instante del tiempo puede calcularse mediante el subprograma md2plotprop.x. Sin embargo, para comparar los valores obtenidos de las simulaciones, calculamos el flujo como lo hacen experimentalmente, ajustando linealmente los datos de las partículas liberadas en función del tiempo para obtener las pendientes a diferentes tamaños del orificio en la salida del silo. Las pendientes se multiplican por el total de las partículas en el silo y se grafica con respecto a los tamaños del orificio.

Cálculo de la densidad y velocidad en función del tamaño del orificio. En el cálculo de la densidad y la velocidad en función del tamaño del orificio, realizamos un promedio vertical de los datos obtenidos en la simulación.

3.3 Cálculo del coeficiente de fricción efectivo

Una vez que conocemos el valor del momento magnético, realizamos una serie de simulaciones para conocer el coeficiente de fricción efectivo (μ_{eff}), que toma valores en un intervalo desde cero hasta uno; en este intervalo consideramos el menor valor posible y un valor donde el coeficiente de fricción es alto [56]. El coeficiente de fricción efectivo es adimensional.

Para corroborar si el coeficiente de fricción usado en las simulaciones es adecuado para reproducir el experimento, comparamos la tendencia de nuestros datos obtenidos por simulaciones con los datos experimentales de la referencia [1]. Las simulaciones se realizaron por decuplicado.

Las implementaciones para simular el silo se realizaron en dos partes. La primera, en la que el silo tiene las paredes laterales no repulsivas. La segunda, en la que el silo tiene las paredes laterales repulsivas, este caso es el análogo al experimental.

3.4 Simulaciones del silo con paredes laterales no repulsivas

Este sistema se construye con paredes laterales no repulsivas, lo cual marca una diferencia con el experimento.

Como el sistema no tiene las paredes repulsivas, una pregunta natural es ¿cómo se comporta el flujo en ausencia de paredes laterales repulsivas? Por lo cual estudiamos el flujo a diferentes coeficientes de fricción y obtuvimos el comportamiento de la figura 3.4.

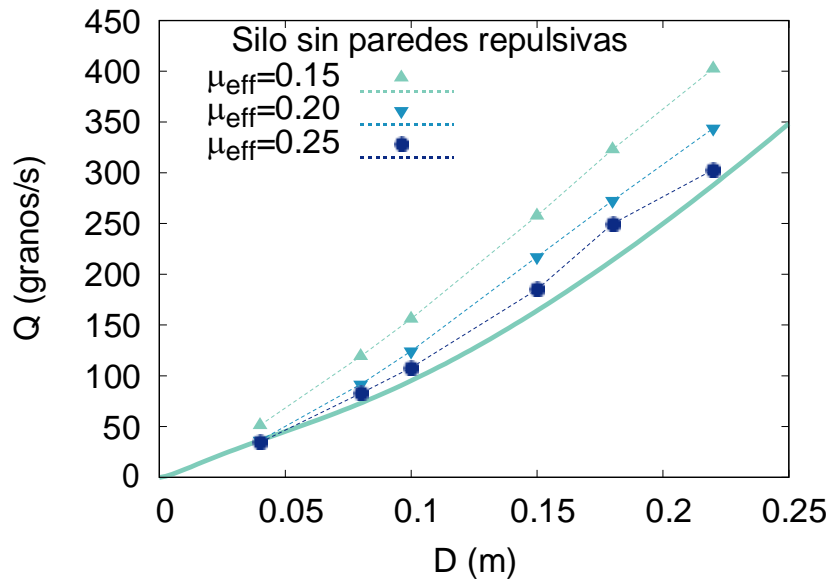


Figura 3.4: Flujo granular, Q , vs diámetro del orificio del silo, D . Los puntos **K** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.15$. Los puntos **V** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.20$. Los puntos **•** representan el flujo a $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. Cada serie, para cada valor de μ_{eff} , está unida por una línea punteada. La línea continua oscura y gruesa representa a la ley modificada de Beverloo (Ec. 2.3 usando $\rho_{\infty} = 1342$ granos/m², $\rho_0 = 4737$ granos/m² y $\sigma = 0.029$ m obtenidos de la parte experimental [1]).

El valor del coeficiente de fricción que reproduce mejor el flujo del silo es $\mu_{\text{eff}} = 0.25$.

Encontramos que al utilizar un valor de $\mu_{\text{eff}} > 0.25$ se interrumpe el flujo, al generarse atascamientos en $D = 0.04$ m, dicho atascamiento no se observa experimentalmente.

Por otro lado, si utilizamos $\mu_{\text{eff}} < 0.25$, el flujo se aleja del comportamiento ideal mostrado por la ecuación propuesta por el Grains Lab (Ec. 2.3).

A pesar de que el comportamiento general del flujo se ajusta a la ecuación 2.3, cuando se usa el coeficiente de fricción de 0.25 y el silo se construye con paredes no repulsivas, las propiedades que contribuyen al flujo no se ajustan al comportamiento ideal de las ecuaciones que describen la velocidad de salida y la densidad de salida (como se observa en las Fig. 3.5 y 3.6).

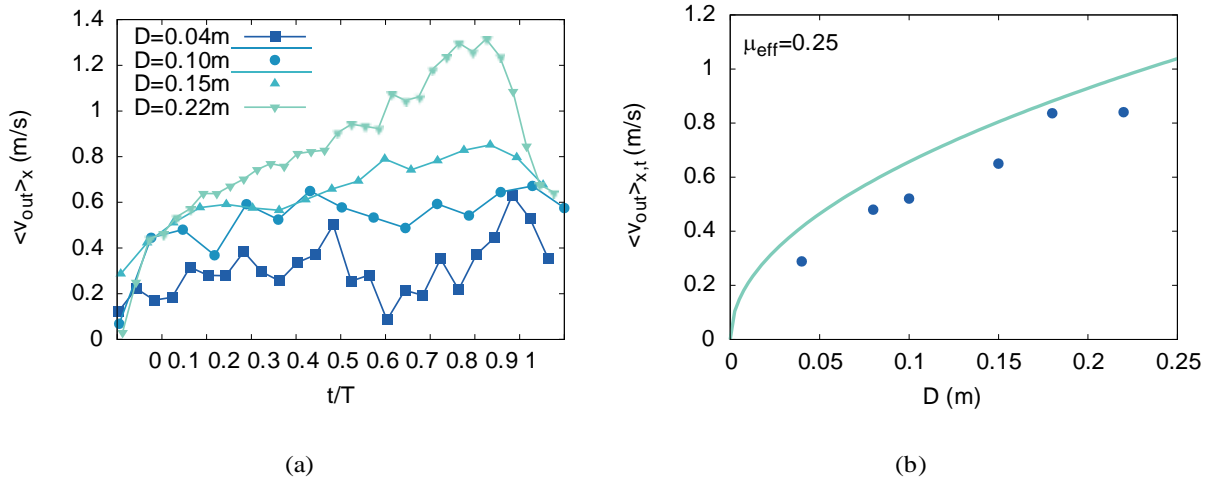


Figura 3.5: **a)** Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo a diferentes tamaños de orificio obtenida de las simulaciones usando $\mu_{eff} = 0.25$. El tiempo está normalizado con el tiempo de descarga T . **b)** Evolución temporal de la velocidad en función del tamaño del orificio obtenida de las simulaciones usando $\mu_{eff} = 0.25$. La línea continua corresponde a la ecuación $\sqrt{2g\beta D}$ (v. Ec. 2.3), usamos el valor experimental de $\beta = 0.22$. Las barras de error son del tamaño del punto.

En la figura 3.5.a observamos que en la descarga del silo a diferentes tamaños del orificio los comportamientos obtenidos por medio de simulaciones mantienen similitud al experimental, donde a valores de $\langle v_{out} \rangle_x < 0.22m$, la velocidad de descarga oscila alrededor de un determinado valor. Pero en el caso $\langle v_{out} \rangle_x > 0.22m$, la velocidad aumenta, esto es así porque la dimensión del tamaño del orificio es cercana al ancho del contenedor, por lo cual las partículas tienden a comportarse como si sufrieran caída libre.

Para observar mejor el comportamiento de la velocidad, analizamos ésta en función del tamaño del orificio, como se muestra en la figura 3.5.b, y observamos que el comportamiento tiende a valores cercanos a la tendencia de la ecuación $\sqrt{2g\beta D}$. Se debe recordar que dicha ecuación describe la velocidad en un silo bidimensional.

Por otra parte, cuando analizamos los datos de la densidad nos percatamos de que los valores iniciales eran mayores a la experimental registrada aproximadamente en 3000 granos/m².

Aunque el comportamiento de la densidad en función del tiempo (Fig. 3.6.a) guarda semejanza con el comportamiento experimental, al producir una meseta durante la descarga

para después decaer conforme el proceso se termina, la densidad decae rápidamente cuando $D > 0.04\text{m}$. Como consecuencia, el comportamiento de la densidad disminuye conforme el tamaño del orificio aumenta, los valores se muestran en la figura 3.6.b, pero no guardan una buena relación con la tendencia de la ecuación $\rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\frac{D}{a}}$. Sin embargo la densidad se encuentra en los mismos órdenes de magnitud que el caso experimental, por lo que creemos que el sistema que construimos con paredes no repulsivas, al no ser exactamente el sistema experimental, produce las diferencias en las propiedades mostradas. Es decir, podemos considerarla una aproximación aceptable.

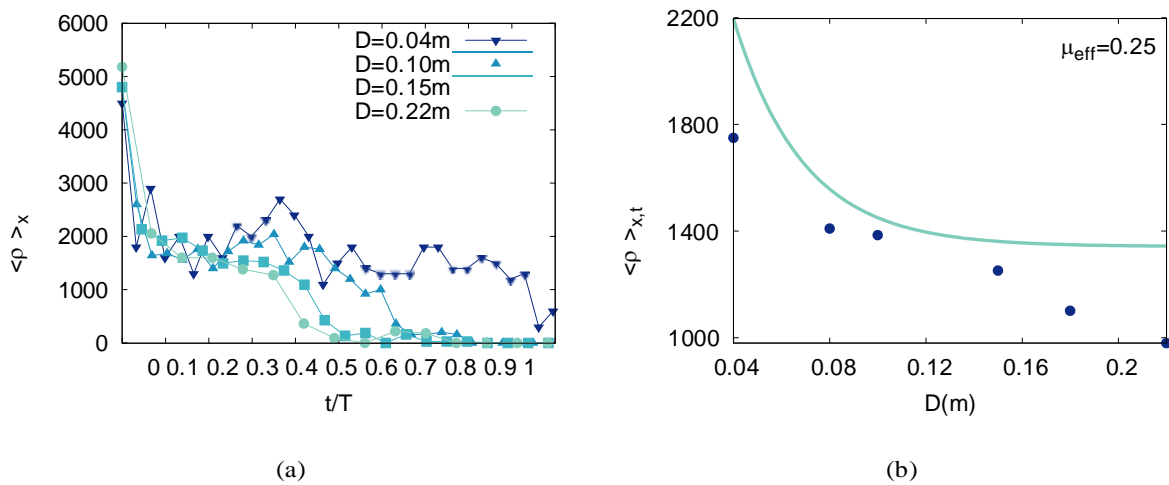


Figura 3.6: **a)** Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes orificios obtenida de las simulaciones con un $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. **b)** Evolución temporal de la densidad en función del tamaño del orificio obtenida de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. La línea continua corresponde a la ecuación $\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\frac{D}{a}}$ (usamos los valores experimentales de ρ_0 , ρ_{∞} y a [1]). Las barras de error son del tamaño del punto.

Las simulaciones reproducen relativamente bien el flujo del proceso de descarga. Esto se debe a que, al combinar las propiedades (velocidad y densidad) que constituyen al flujo, éstas se combinan entre sí, es decir, cuando la velocidad es alta, la densidad es baja y viceversa.

3.5 Simulaciones del silo con paredes laterales repulsivas

Debido a las discrepancias descritas en la sección anterior entre las mediciones experimentales y las obtenidas de las simulaciones, mejoramos el programa e implementamos paredes laterales repulsivas. De esta manera realizamos de nuevo la exploración para encontrar un coeficiente de fricción que reprodujera el sistema experimental y su comportamiento, pero ahora con unas condiciones más análogas a las experimentales, como se observa en las figuras 3.7.A y 3.7.C.

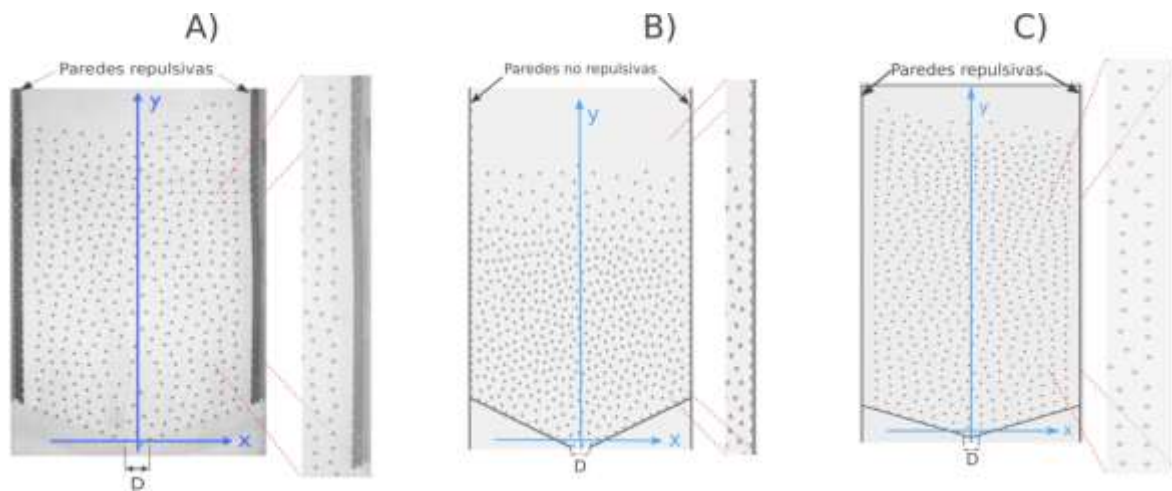


Figura 3.7: Imágenes del sistema experimental y de los sistemas usados en las simulaciones. **A)** Esquema del sistema experimental original, el cual tiene paredes repulsivas. **B)** Esquema del sistema de las simulaciones sin paredes repulsivas (véase sección 3.4). **C)** Esquema del sistema de las simulaciones análogo al experimental (véase sección 3.5).

En la figura 3.8, obtenida de las simulaciones, se observa la formación de arcos cuando el tamaño del orificio es pequeño ($D \leq 0.03$ m). La formación de estos arcos se había observado en sistemas granulares estándares.

También se encuentran en sistemas granulares con propiedades repulsivas [1]. En sistemas granulares repulsivos las partículas mantienen la formación del arco gracias a la distribución de las fuerzas repulsivas que existe entre ellas y a las fuerzas que actúan en nuestro sistema (véase Fig. 3.8.C), el peso de las partículas es soportado por las paredes frontales,

mediante la fricción de los discos con estas paredes.

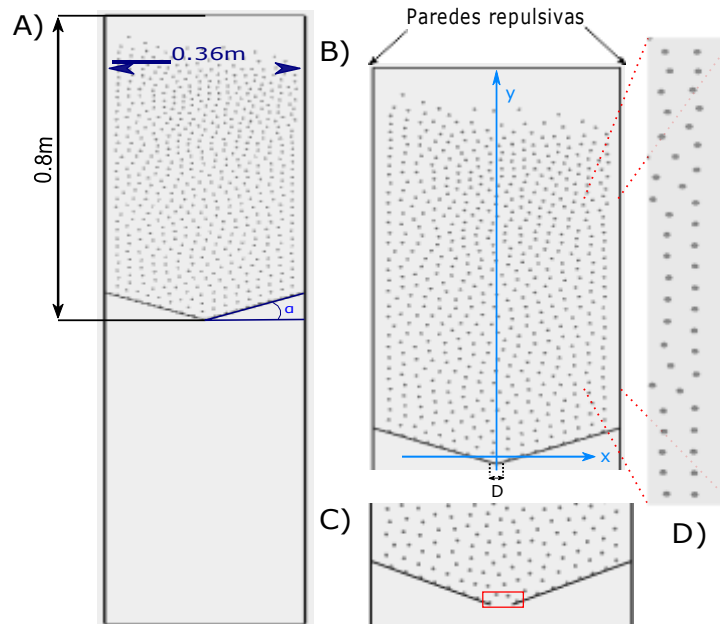


Figura 3.8: A) y B) Imágenes obtenidas de DEMDySiGMA del silo bidimensional lleno con materia granular repulsiva. C) Arco magnético observado en orificios pequeños. D) Imagen ampliada en la que se muestra la separación entre las partículas y las paredes laterales, debido a la repulsión pared lateral-partícula.

Determinamos que en este caso, cuando se usan paredes laterales repulsivas, el valor de $\mu_{\text{eff}} = 0.23$ reproduce mejor los datos experimentales. A continuación se muestran los resultados de las simulaciones y el porqué elegimos dicho valor del coeficiente de fricción para reproducir el comportamiento experimental. Ya que las simulaciones que se presentan en esta sección son las que se ajustan mejor a los datos experimentales, se realiza un análisis más detallado y profundo, con respecto al caso donde no hay paredes repulsivas.

En el conjunto de imágenes de la figura 3.9 se observa la descarga del silo bidimensional lleno con materia granular repulsiva y con las paredes laterales repulsivas, que es análogo al experimental mostrado en la figura 2.1.

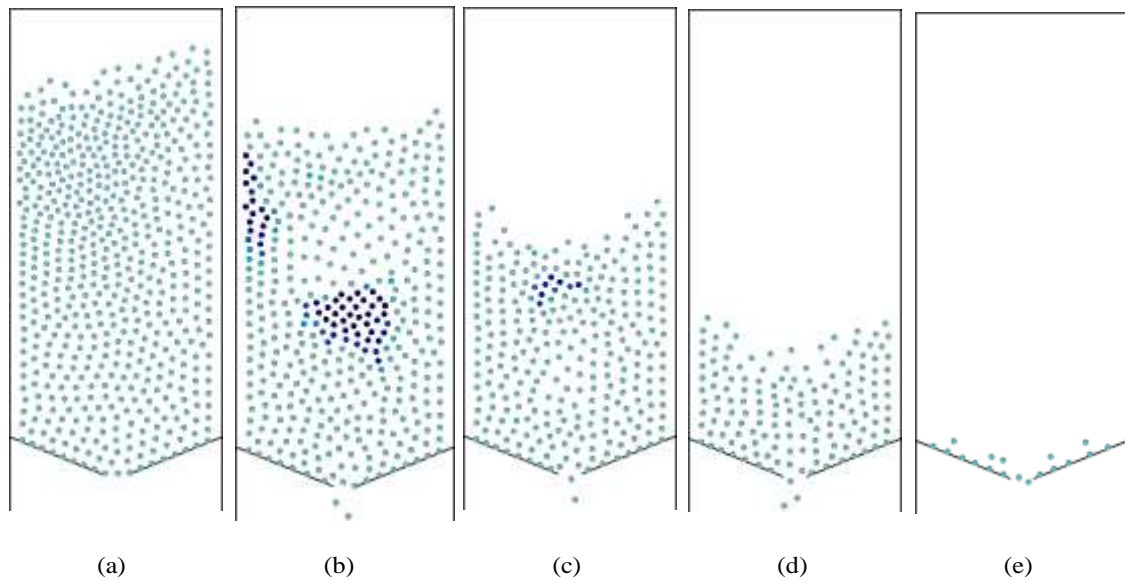


Figura 3.9: Ejemplo de la descarga del silo lleno de materia granular repulsiva usando $D = 0.04$ m y $\mu_{\text{eff}} = 0.23$.

Las imágenes (Fig. 3.9) se realizaron con el subprograma `md2drenderframes.x` del programa DEMDySiGMa y PovRay. Observamos que la descarga se lleva a cabo desde el centro del silo y conforme se vacía, las paredes repulsivas empujan las partículas hacia el centro del silo.

En las imágenes, las partículas tienen las mismas características físicas, y la diferencia de color se debe a la suma de las magnitudes de las fuerzas magnéticas que actúan sobre la partícula. Cuanto más oscura es una partícula, mayor es el valor de la suma (Ec. 2.6). Con la diferencia de color de las partículas en la figura 3.9 observamos que en ciertas zonas del centro del silo la distribución de las fuerzas es mayor, esto se debe a que la densidad en esa zona aumenta. La fuerza de fricción con las paredes frontales desempeña un papel importante en este comportamiento, porque la fuerza de fricción se opone al movimiento en la descarga de las partículas, en consecuencia el movimiento de las partículas disminuye, de manera que se genera un equilibrio transitorio que no impide el flujo de la descarga pero sí genera una aglomeración en la zona centro del silo, por lo que aumenta la densidad en dicha zona.

Para elegir el valor que reproduce mejor las propiedades en la descarga del silo, analizamos las propiedades para diferentes valores de coeficiente de fricción.

Se inicia por graficar el número de partículas que salen del silo en función del tiempo. Se muestra en la figura 3.10 el comportamiento del número de partículas que salen del silo cuando sus coeficientes de fricción son distintos.

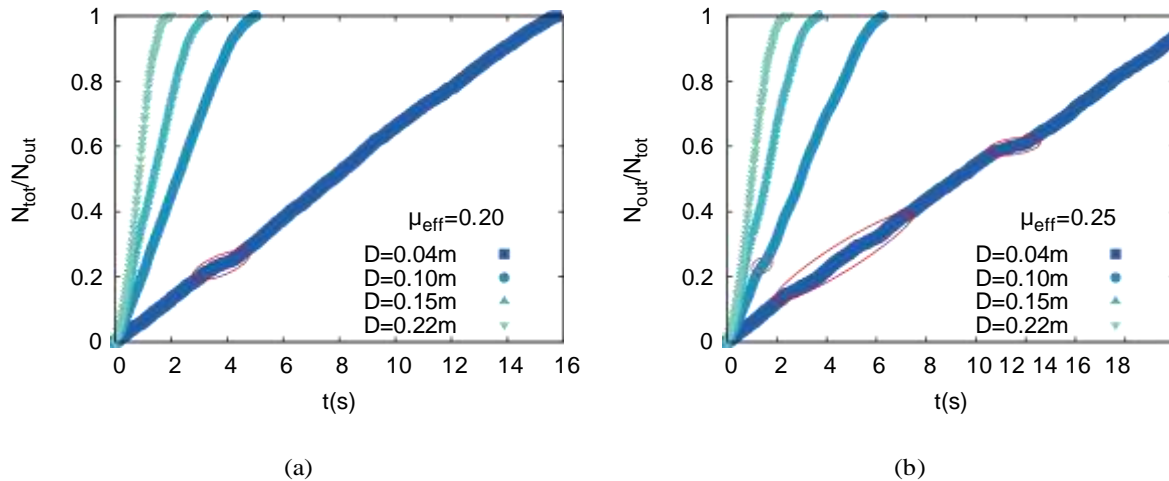


Figura 3.10: Partículas liberadas en función del tiempo en silos con diferentes tamaños de orificio. Los círculos rojos muestran las fluctuaciones de las partículas liberadas a coeficientes de fricción de 0.20 (a) y 0.25 (b).

Como se observa en la figura 3.10, cuando el coeficiente de fricción toma valores de $\mu_{eff} = 0.20$ y $\mu_{eff} = 0.25$, el flujo fluctúa. Creemos que las fluctuaciones se deben a dos causas. En la primera, cuando $\mu_{eff} = 0.20$, el movimiento de las partículas no está impedido, por lo cual en un tiempo determinado las partículas se aglomeran en la salida del silo y esto hace que se genere un atascamiento momentáneo. En la segunda, cuando $\mu_{eff} = 0.25$, el movimiento de las partículas se ve impedido por la fuerza de fricción y esto genera que en la salida del silo haya atascamientos momentáneos y con mayor frecuencia, tanto es así que en algunos casos el atascamiento en la salida se prolonga por un tiempo largo en las simulaciones.

En términos generales, el comportamiento de las partículas que salen del silo se mantiene similar al observado experimentalmente. Sin embargo, en valores de $\mu_{eff} > 0.25$, los atascamientos impiden la descarga del silo, y en valores $\mu_{eff} \leq 0.20$, la densidad inicial se ve

umentada debido a que las partículas se compactan; esto sucede porque el coeficiente de fricción no es suficiente para regular el movimiento de las partículas, que se pueden acercar más entre sí hasta que la fuerza de repulsión y la fricción alcanzan un equilibrio.

Exploramos de manera detallada el intervalo donde el coeficiente de fricción efectivo toma valores $0.20 \leq \mu_{\text{eff}} < 0.25$. De este estudio encontramos que los problemas con respecto a los atascamientos y la alta densidad inicial se resuelven al usar el coeficiente de fricción de 0.23.

En la figura 3.11 se observa la tendencia de las partículas liberadas en función del tiempo en silos con diferentes D cuando el coeficiente de fricción es de 0.23.

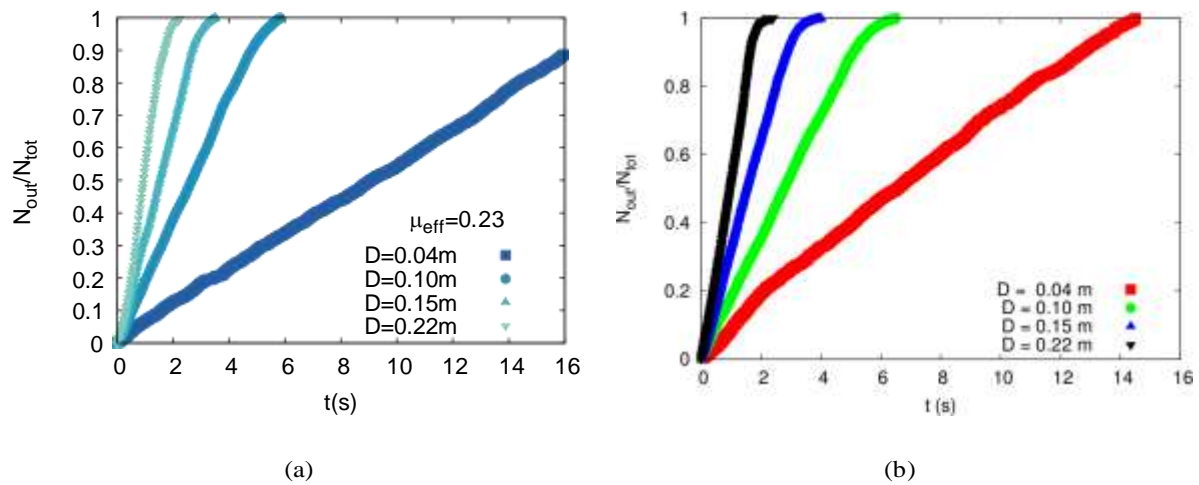


Figura 3.11: a) Partículas liberadas en función del tiempo a diferentes tamaños de orificio obtenidas de las simulaciones usando un valor $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. b) Partículas liberadas en función del tiempo a diferentes tamaños de orificio obtenidas experimentalmente.

El comportamiento de las partículas, al ser liberadas del silo, se ajusta a una ecuación lineal, excepto al final del proceso de descarga. Podemos inferir que la liberación de las partículas se mantiene constante durante la descarga del silo, pero al final del proceso las partículas se van terminando y eso genera la pequeña curvatura al final de las líneas de la figura 3.11. En términos de la fuerza, al disminuir el número de partículas, la fuerza que actúa entre ellas también disminuye, por lo que las partículas tardan más en salir del silo y se genera la curvatura final. Tanto las simulaciones como los resultados experimentales

mantienen un comportamiento análogo.

El comportamiento general de las partículas liberadas en la simulación es similar al experimental, aunque podemos encontrar pequeñas diferencias entre ellas. Cuando $D = 0.04$ m, el tiempo en la simulación es ligeramente mayor que el observado en el experimento. Esto se debe al efecto que tienen los valores de los parámetros que elegimos para simular el comportamiento en la descarga del silo. Cuando $D > 0.04$ m, no se observan diferencias entre las simulaciones y los experimentos.

La fuerza de fricción y las fuerzas presentes en nuestro sistema reproducen de manera aproximada el comportamiento de la liberación de las partículas.

Con lo anterior como premisa, se puede decir que al usar el coeficiente de fricción $\mu_{\text{eff}} = 0.23$ reproducimos de manera aceptable la tendencia en la que se descarga el silo.

Una vez obtenido el comportamiento de las partículas al ser liberadas del silo, exploramos el comportamiento del flujo en el intervalo de trabajo ($0.20 \leq \mu_{\text{eff}} < 0.25$) y mostramos los gráficos de los casos donde usamos $\mu_{\text{eff}} = 0.20$ y $\mu_{\text{eff}} = 0.25$ para justificar la elección del mejor valor de coeficiente de fricción efectivo.

La forma en la que obtenemos el flujo, en cualquiera de los casos, es ajustando la fracción de partículas liberadas con una ecuación lineal de la forma $y = b + mx$, de esta manera obtenemos la pendiente m para cada D . Dicha pendiente la relacionamos físicamente con el flujo y la graficamos con respecto a cada tamaño del orificio.

En general se observa que en la figura 3.12 la aproximación al flujo ideal descrito por la ecuación 2.3 es bastante buena desde que utilizamos valores de $\mu_{\text{eff}} \geq 0.20$, a pesar de que, cuando $\mu_{\text{eff}} = 0.20$, aparece una divergencia bastante notoria entre los puntos calculados y la tendencia de la ecuación 2.3. Cuando $\mu_{\text{eff}} = 0.25$, la aproximación entre los puntos calculados y la línea continua son bastante próximos, sin embargo en este valor (0.25) ya se presentan algunos casos de atascamientos en $D = 0.04$ m, dicho comportamiento no se observa experimentalmente, por esta razón descartamos este valor de coeficiente de fricción en las simulaciones.

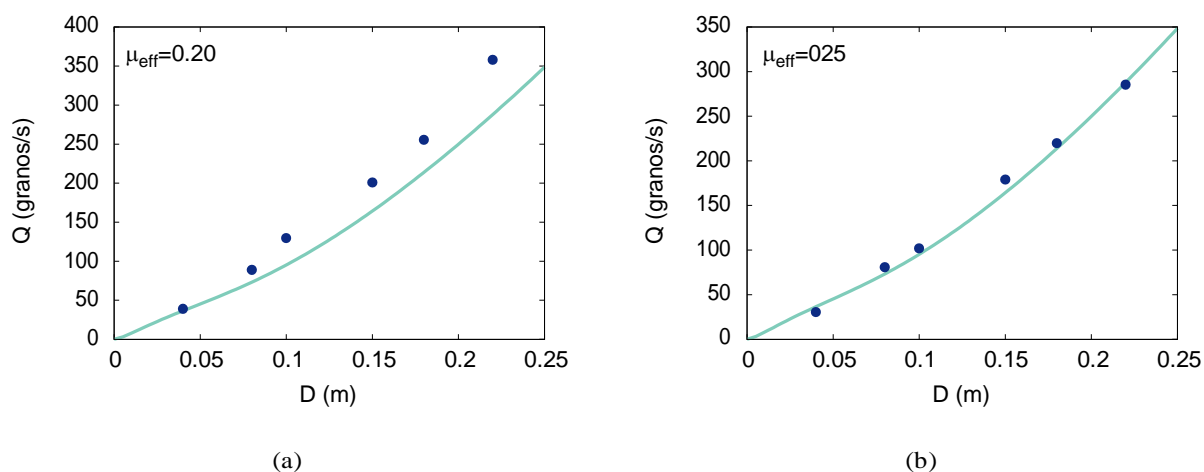


Figura 3.12: El flujo, Q , en función del tamaño del orificio en la salida del silo. **a)** Flujo obtenido de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.20$. **b)** Flujo obtenido de las simulaciones con $\mu_{\text{eff}} = 0.25$. En los dos casos la línea continua corresponde a la ecuación modificada de Beverloo (usamos los valores experimentales de ρ_0 , ρ_∞ y a en la ecuación 2.3). En **a)** y **b)** las barras de error son del tamaño del punto.

Posteriormente exploramos los valores de $0.21 \leq \mu_{\text{eff}} \leq 0.24$ y confirmamos que el valor del coeficiente de fricción que reproduce mejor el experimento es aquél que toma un valor de 0.23.

Los criterios para elegir el valor de $\mu_{\text{eff}} = 0.23$ (véase Fig. 3.13) como el valor que reproduce mejor la descarga del silo fueron los siguientes: primero observamos la tendencia de las partículas liberadas en función del tiempo, después hicimos lo mismo con el flujo y comparamos los valores obtenidos por simulaciones con la ecuación $Q = \rho_\infty + \rho_0 - \rho_\infty e^{-\frac{D}{a} \sqrt{2g\beta D}}$,

con dicha comparación encontramos que los valores teóricos y los experimentales se encuentran en los mismos órdenes de magnitud. No sólo eso, cuando se usa $\mu_{\text{eff}} = 0.23$ se evitan los atascamientos indeseados en silos con $D = 0.04$ m.

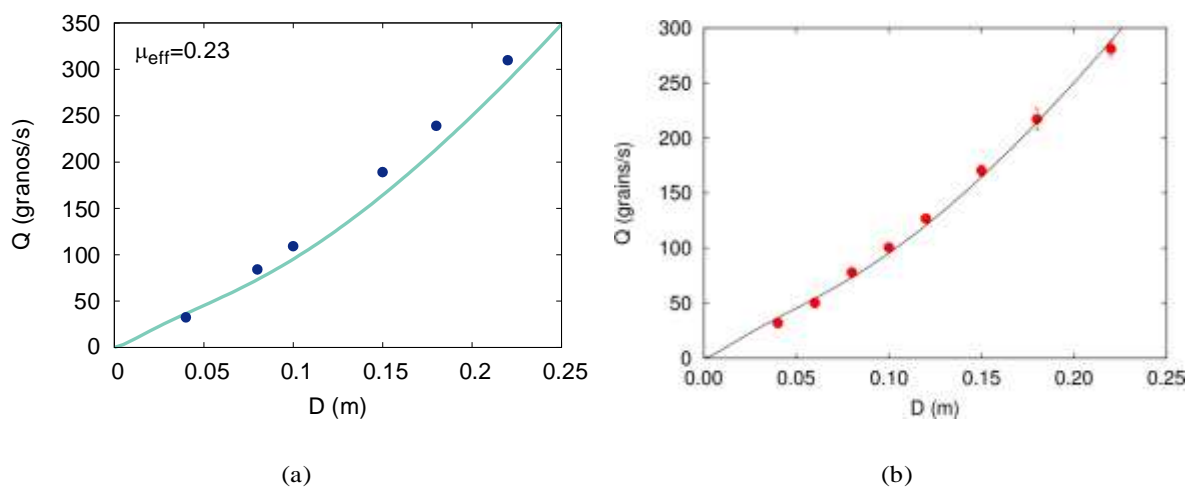


Figura 3.13: **a)** Representa el flujo en función del tamaño del orificio del silo obtenido de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. **b)** Representa el flujo en función del tamaño del orificio obtenido experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa la ley modificada de Beverloo, el ajuste se realiza con los valores experimentales de ρ_{∞} , ρ_0 y a .

La densidad inicial experimental (aproximadamente de 3000 granos/m²) se reproduce en las simulaciones.

De lo anterior inferimos que el programa DEMDySiGMa reproduce los resultados experimentales y además las observaciones se ajustan al comportamiento de la ecuación propuesta por el Grains Lab (Ec. 2.3).

Asimismo validamos que el modelo matemático que utilizamos para describir a la materia granular repulsiva es una buena aproximación al campo de fuerzas que rige nuestro sistema.

Con base en los resultados anteriores, estudiamos las propiedades que componen el flujo, recordando la expresión $Q = \rho_{\infty} + \rho_0 - \rho_{\infty} e^{-\frac{D}{a}} \sqrt{2g \beta D}$, donde el primer término co-

responde a la densidad y el segundo a la velocidad, ambas propiedades en la proximidad de la salida del silo. Véase sección 3.2 para mejores detalles del cálculo de las propiedades.

En la figura 3.14 observamos el comportamiento de la velocidad promedio en la proximidad de la salida del silo en función del tiempo. Experimentalmente, la velocidad en la descarga del silo en tamaños del orificio menores a 0.15 m se mantiene prácticamente cons-

tante en un determinado intervalo de velocidad a lo largo del proceso de descarga y en tamaños del orificio mayores a 0.15 m, la velocidad de salida aumenta con el tiempo. Dicho incremento se produce porque el tamaño del orificio se aproxima al ancho del silo y el confinamiento en la salida es menos importante; el contenido del silo experimenta una caída libre. El comportamiento que obtenemos de las simulaciones no está bien definido como en el caso experimental; a pesar de esa diferencia notamos que la velocidad en la salida del silo mantiene un comportamiento análogo al experimental y en órdenes semejantes. Además llegamos a las mismas hipótesis del comportamiento con respecto al tamaño del orificio del silo.

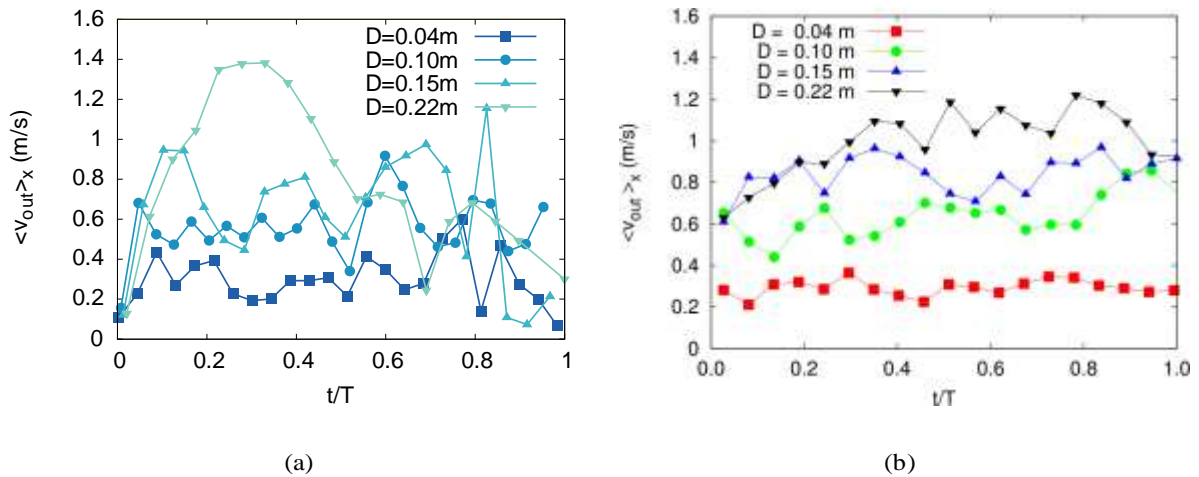


Figura 3.14: **a)** Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo con diferentes D obtenido de las simulaciones usando $\mu_{eff} = 0.23$. **b)** Evolución temporal de las velocidades promedio en la salida del silo con diferentes D obtenido experimentalmente. En ambos casos el tiempo está normalizado con el tiempo de descarga T .

No obstante, una mejor comparación entre los valores de velocidad consiste en realizar el promedio de las velocidades en función del tamaño del orificio y efectuar un ajuste con el término que describe la velocidad en la ecuación 2.3. En la Fig. 3.15 se muestra el gráfico de la velocidad promedio en función del tamaño del orificio.

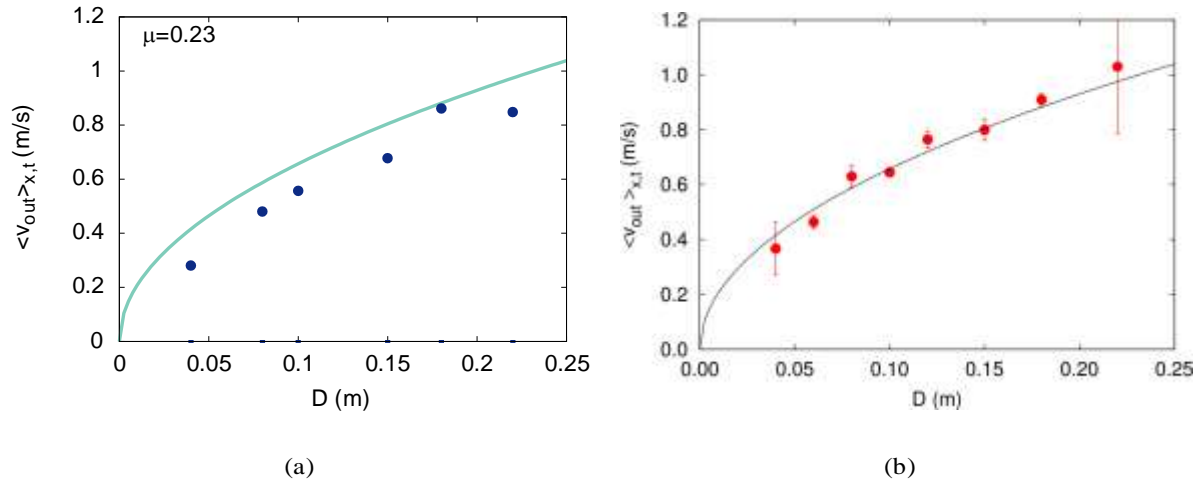


Figura 3.15: **a)** Evolución temporal de la velocidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida por simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. **b)** Evolución temporal de la velocidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa el comportamiento ideal de la velocidad.

Al calcular la velocidad en función del tamaño del orificio se constata la similitud del comportamiento en los dos casos. Además observamos que las velocidades ($(V_{out})_{x,t}$) obtenidas por simulaciones mantienen los mismos órdenes de magnitud.

Por otra parte, en la figura 3.16 se observa que en el experimento la evolución temporal de la densidad en silos con diferentes D disminuye, alcanzando una meseta. Finalmente, en cerca del 70% del proceso de descarga, la densidad decrece hasta que el silo se vacía. Este comportamiento se observa también en las simulaciones.

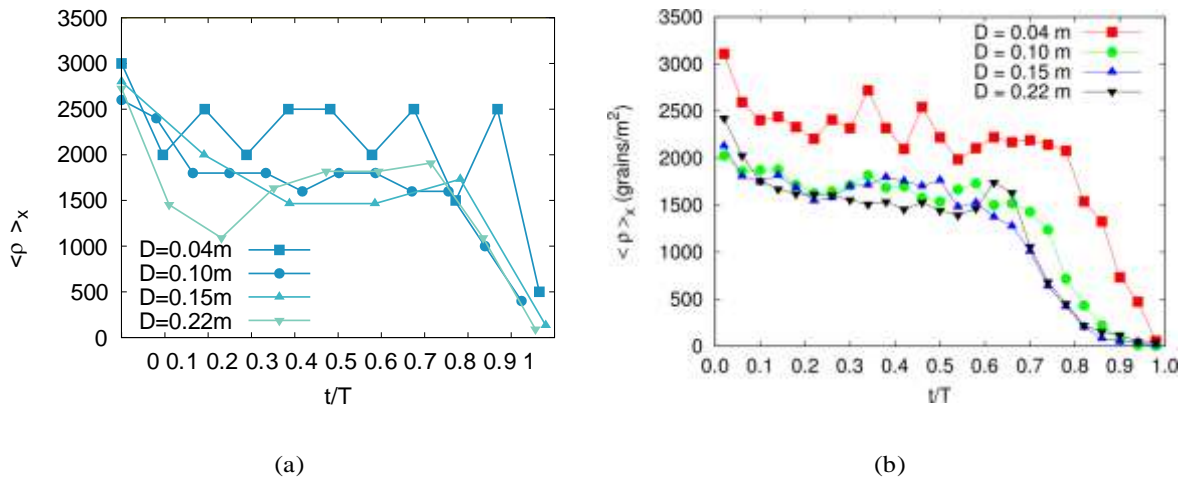


Figura 3.16: **a)** Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes D obtenida de las simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. **b)** Evolución temporal de la densidad promedio en la salida del silo con diferentes D obtenida experimentalmente.

De igual manera que cuando se compara la velocidad de salida, ahora realizamos la comparación de la densidad de salida en función del tamaño del orificio en la salida del silo (véase Fig. 3.17). De dicha comparación, se concluye que, al ajustar el comportamiento con respecto a la ecuación 3.1, los valores obtenidos de forma experimental y los valores teóricos de las simulaciones son semejantes y en los mismos órdenes de magnitud. Se constata también que la densidad decrece conforme el tamaño del orificio en la salida del silo aumenta.

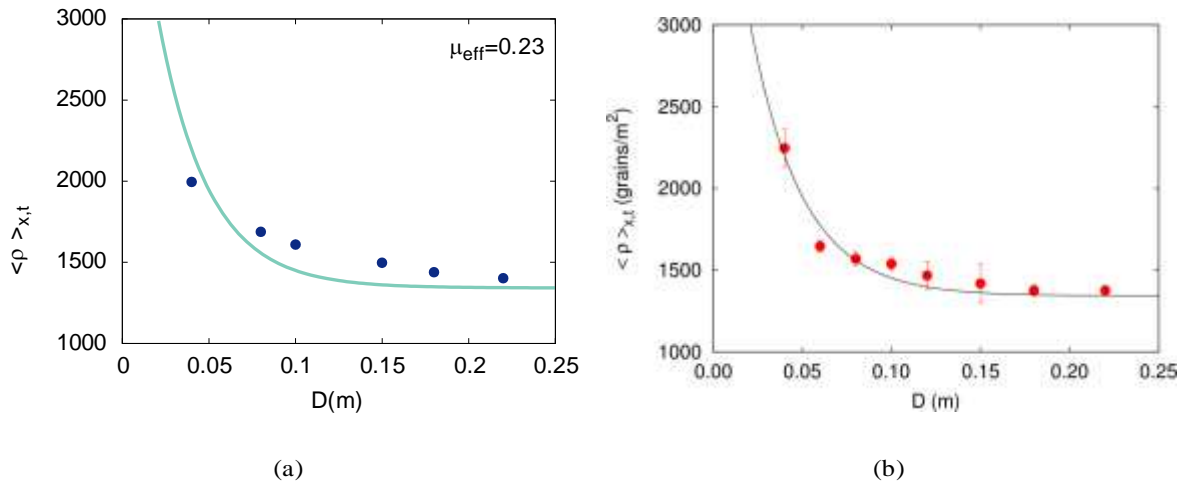


Figura 3.17: **a)** Evolución temporal de la densidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida mediante simulaciones usando $\mu_{\text{eff}} = 0.23$. Las barras de error son del tamaño del punto. **b)** Evolución temporal de la densidad en la salida del silo en función del tamaño del orificio obtenida experimentalmente. Se muestran las barras de error. En ambos casos la línea continua representa la tendencia de la ecuación $\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\frac{D}{a}}$, donde usamos los valores de ρ_0 , ρ_{∞} y a obtenidos experimentalmente.

El decremento en la densidad constituye una diferencia con el flujo de materia granular estándar. El decremento de la densidad lo describe la ecuación (Ec. 3.1), propuesta por el Grains Lab:

$$\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\frac{D}{a}}, \quad (3.1)$$

donde $\rho_{\infty} = 1342 \pm 29$ granos/m², $\rho_0 = 4737 \pm 716$ granos/m² y $a = 0.029 \pm 0.004$ m, todos estos valores se obtuvieron de experimentos.

Para contrastar el comportamiento de la densidad realizamos una estimación por el método de mínimos cuadrados con la ecuación 3.1 y obtuvimos los valores de ρ_{∞} , ρ_0 y a que se ajustan a las simulaciones (véase Fig. 3.18).

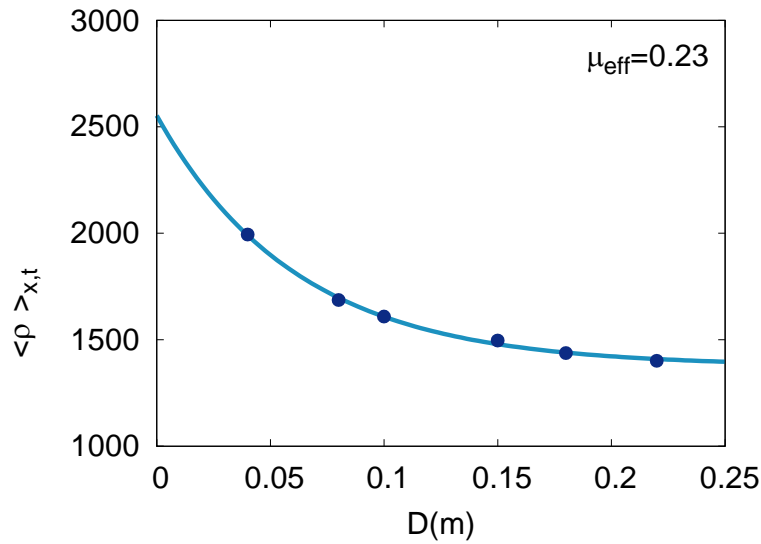


Figura 3.18: Ajuste con la ecuación $\langle \rho \rangle_{x,t} = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty})e^{-\sigma/D}$ para obtener los valores de ρ_{∞} , ρ_0 y σ . Las barras de error son del tamaño del punto.

Al realizar un ajuste con la ecuación 3.1 (como se muestra en la figura 3.18), obtenemos los valores de $\rho_{\infty} = 1377.02 \pm 16.61$ granos/m², $\rho_0 = 2553.41 \pm 62.45$ granos/m² y $\sigma = 0.061 \pm 0.004$ m, que describen el comportamiento de la densidad en las simulaciones.

3.6 Diferencias entre las cadenas de fuerzas de un sistema granular estándar y uno repulsivo

Un comportamiento interesante que presentan los sistemas granulares es la formación de patrones de distribución de las fuerzas que se conoce como cadena de fuerzas o cadena de esfuerzos.

En un sistema granular estándar es bien conocido el comportamiento general de la distribución de las fuerzas. Se ha observado que en un sistema granular estándar bidimensional, las cadenas de fuerzas se distribuyen hasta las paredes laterales del contenedor y al fondo de éste (véase Fig. 3.19.a). Las cadenas de fuerzas se forman cuando una partícula está sujeta por las de debajo de ella y a su vez las partículas de abajo se encuentran sujetas por las de

más abajo, así sucesivamente hasta alcanzar el límite del contenedor.

Una pregunta que surge es: ¿Cuál es el patrón de las cadenas de fuerzas en materia granular repulsiva?

Con ayuda del programa DEMDySiGMA realizamos la comparación entre los patrones que forman las cadenas de fuerzas de la materia granular estándar y de la materia granular repulsiva.

Para estudiar la formación de las cadenas de fuerzas creamos un sistema donde se genere la penetración de un proyectil en un contenedor lleno de materia granular tanto estándar como repulsiva, de esta forma se podrá observar cómo las partículas del medio granular sostienen los proyectiles (partículas color negro y de mayor tamaño de la figura 3.19).

En la figura 3.19 observamos que en el caso (3.19.a) de materia granular estándar, el patrón de las cadenas de fuerzas se distribuye hasta las paredes laterales y el fondo del contenedor, como era de esperar en este sistema.

En cambio, en materia granular repulsiva (3.19.b) el patrón que se forma es diferente al estándar; en este caso la distribución sólo tiene un corto alcance y las partículas que sostienen al proyectil son las que están alrededor de éste. También se observa que mientras que el peso de las partículas lo sostienen por las paredes laterales y el fondo del contenedor en materia granular estándar, en materia granular repulsiva el peso de las partículas está sostenido por las paredes frontales del contenedor.

La diferencia en la distribución de las cadenas de fuerzas se debe a la naturaleza del sistema; ésta es la principal causa de los patrones formados en el medio granular. Por otro lado, como el patrón de las cadenas de fuerzas se ve afectado por la fuerza que rige el sistema, en un sistema granular estándar la fuerza principal es la fricción entre partículas. En cambio en un sistema granular repulsivo la fuerza predominante es la fuerza de repulsión entre las partículas. Por esta diferencia entre los sistemas observamos que las cadenas de fuerzas en materia granular estándar y materia granular repulsiva se comportan de forma diferente.

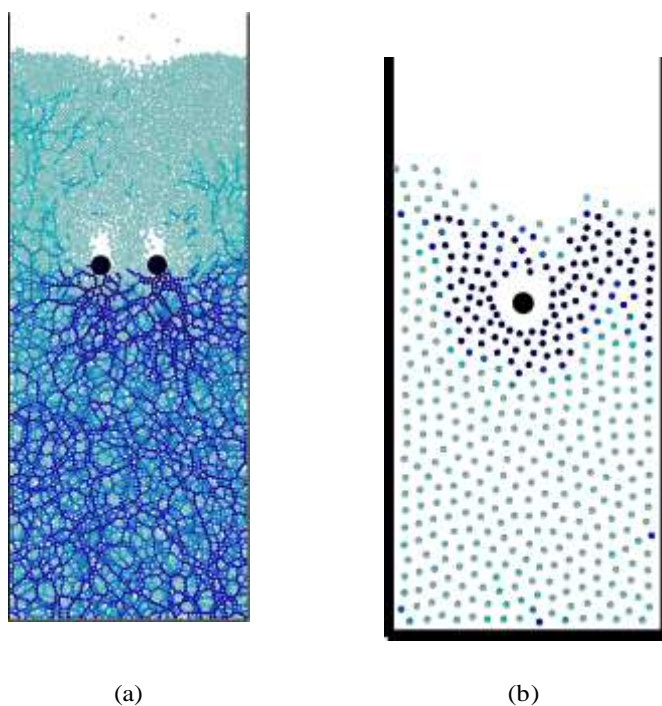


Figura 3.19: Imágenes obtenidas mediante simulaciones con DEMDySiGMA. **a)** Patrón formado por la distribución de las cadenas de fuerzas en materia granular estándar. **b)** Patrón formado por la distribución de las cadenas de fuerzas en materia granular repulsiva.

Asimismo, la forma en la que se crean las cadenas de fuerzas depende también de la distribución espacial de las partículas del material. Cualquier cambio en la compactación del medio provocaría que las cadenas adoptasen otra forma. Esto incluye a la naturaleza del medio, como observamos en el caso en que las partículas no tienen contacto entre ellas.

Conclusiones

De las simulaciones realizadas con el programa DEMDySIGMa concluimos que éste es lo suficientemente robusto como para estudiar sistemas granulares repulsivos. Además de considerar las interacciones magnéticas repulsivas partícula-partícula, se implementó la interacción pared-partícula.

El programa simula las fuerzas presentes en nuestro sistema de manera adecuada.

Comprobamos que las implementaciones realizadas en el programa para efectuar el análisis numérico pre-dinámica y post-dinámica son correctas y reproducen las propiedades, determinadas experimentalmente, en la descarga del silo lleno con materia granular repulsiva.

De este trabajo obtuvimos valores de los parámetros físicos del momento magnético ($M = 0.046827 \text{ A m}^2$) y del coeficiente de fricción efectivo ($\mu_{\text{eff}} = 0.23$) necesarios para reproducir los datos experimentales en la descarga del silo lleno con materia granular repulsiva (las partículas (imanes) usadas en el llenado tienen las características siguientes: discos de neodimio con un diámetro de 5 mm, un grosor de 3 mm y con una masa de 0.4 g. Con los parámetros físicos obtenidos de las simulaciones reprodujimos las observaciones experimentales globales.

De las simulaciones concluimos que el comportamiento global del flujo no se ve afectado significativamente cuando se construye el sistema con paredes laterales repulsivas o no repulsivas. Sin embargo, sí se modifica el confinamiento de las partículas, provocando que el

coeficiente de fricción sea menor cuando se incluye la repulsión en las paredes ($\mu_{\text{eff}} = 0.23$). No obstante, cuando usamos las paredes repulsivas en las simulaciones, la tendencia en las propiedades que componen el flujo (la velocidad y la densidad) mejoran con respecto al sistema donde no usamos dichas paredes. Por estas razones concluimos que el uso de las paredes repulsivas es necesario para obtener un comportamiento análogo al experimental cuando estudiamos las propiedades que componen el flujo en el proceso de descarga del silo.

El comportamiento de las cadenas de fuerza formado dentro del sistema granular repulsivo presenta diferencias con respecto a un sistema granular estándar (donde hay contacto entre las partículas). En el sistema bidimensional de materia granular estándar, las fuerzas se distribuyen hasta las paredes laterales y el fondo del contenedor. La propagación de la fuerza de fricción se lleva a cabo mediante el contacto entre las partículas. Así, las paredes laterales y el fondo del contenedor sostienen el peso de todo el sistema. En cambio, con materia granular repulsiva, las cadenas de fuerza se extienden en un área muy limitada y el peso de las partículas está sostenido principalmente por las paredes frontales del contenedor.

Celda Hele-Shaw

Normalmente el término celda Hele-Shaw se utiliza en dinámica de fluidos (rama de la física que estudia fluidos en movimiento) y es útil para estudiar el movimiento de un fluido a través de ella. Ésta se compone de dos placas (normalmente de vidrio) separadas ligeramente entre sí (distancia z en la Fig. A.1), esto limita el movimiento del fluido a dos dimensiones.

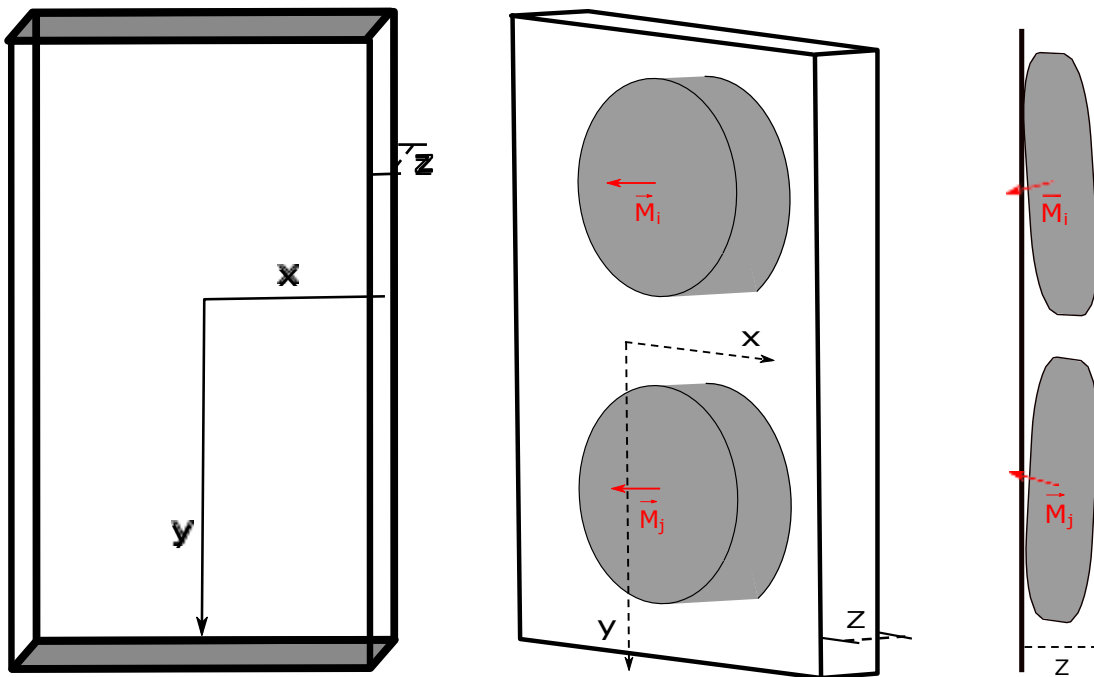


Figura A.1: Esquema de la celda Hele-Shaw

En este trabajo se estudia un fluido granular repulsivo compuesto por discos con momentos magnéticos paralelos, con ayuda de la restricción de la celda se impide que los discos se volteen por la repulsión que se genera al disminuir la distancia entre ellos, de esta manera nos aseguramos de mantener siempre una configuración repulsiva.

Deducción matemática del flujo

En el presente trabajo utilizamos la ecuación del flujo para materia granular propuesta por el Grains Lab [1].

En el afán de hacer lo más claro posible el trabajo, realizamos un análisis de las expresiones que describen el flujo en la descarga del silo.

Las consideraciones que hacemos para deducir las ecuaciones del flujo granular son:

1. Definimos el flujo como: la densidad de materia que pasa a través de una región espacial en función del tiempo.

La ecuación que describe este comportamiento es:

$$Q = \frac{\rho r_{es}}{t}, \quad (\text{B.1})$$

donde Q es el flujo, ρ la densidad de materia, r_{es} es la región espacial y t el tiempo. El flujo está en unidades de cantidad de materia por unidad de tiempo.

2. Para un silo bidimensional (véase Fig. B.1) consideramos que la densidad es la densidad promedio en nuestro sistema y r_{es} está definida por $h D$, donde h es la distancia que debe recorrer la materia para salir del silo y pasar a través de un orificio de diámetro D en un tiempo t . Tomando en cuenta las consideraciones anteriores, podemos escribir el flujo como:

$$Q = \frac{|\rho| h D}{t}, \quad (\text{B.2})$$

donde el cociente $\frac{h}{v}$ es igual a la velocidad promedio para salir del silo (\bar{v}). Sustituimos la velocidad en la ecuación B.2 y obtenemos la siguiente expresión:

$$Q = |\rho| \bar{v} D. \tag{B.3}$$

3. Para obtener una expresión que describe mejor al flujo en un medio granular estándar se toman en cuenta dos premisas: (i) cuando el orificio en la salida del silo es menor al umbral $k d$; donde k es una constante empírica que depende del medio y d es el diámetro de las partículas, se bloquea el flujo (ii) al pasar a través del orificio, las partículas experimentan caída libre.

4. Tomando en cuenta la premisa ii del punto 3 determinamos la velocidad con ayuda de la ecuación de movimiento para caída libre, de la que obtuvimos la expresión para la velocidad en una distancia x :

$$v = \sqrt{2 g x}. \tag{B.4}$$

En nuestro sistema, la distancia x en la salida del silo está determinada por la formación de un arco. El arco está definido por el término βD , donde β es una constante de proporcionalidad del arco y D es el tamaño del orificio. Teniendo en cuenta lo anterior, la velocidad se reescribe como:

$$v = \sqrt{2 g \beta D}. \tag{B.5}$$

5. Si consideramos la premisa i del punto 3 y la velocidad en la salida del silo (Ec. B.5) del punto 4, obtenemos la expresión para el flujo

$$Q = |\rho| \sqrt{2 g \beta D} (D - kd). \tag{B.6}$$

La ecuación B.6 describe el flujo en un silo bidimensional.

En la descarga de materia granular se ha observado que el comportamiento de la densidad en este proceso decrece a medida que el orificio de salida del silo aumenta. Empíricamente encontraron que la relación que describe mejor esta propiedad es una exponencial decreciente [28].

En materia granular repulsiva se espera que el comportamiento del flujo sea similar al de materia granular estándar. Por ello, el laboratorio de materiales granulares (Grains Lab) propone una expresión para describir el flujo de este sistema. La ecuación recibe el nombre de ley modificada de Beverloo (v. Ec. B.7) y proviene de modificar el término de la densidad y considerar que $k = 0$, con lo que se obtiene la siguiente expresión:

$$Q = \frac{\rho_0 - \rho_\infty}{\rho_\infty + \rho_0 - \rho_\infty} \frac{\rho_0 - \rho_\infty}{e^{-\frac{D}{a}}} \frac{D^2}{2g\beta D} \quad (B.7)$$

donde el término $\frac{\rho_0 - \rho_\infty}{\rho_\infty + \rho_0 - \rho_\infty} \frac{\rho_0 - \rho_\infty}{e^{-\frac{D}{a}}}$ es la densidad. En la referencia [1] se encontró que

$\rho_0 = 4737 \pm 716$ granos/m², $\rho_\infty = 1342 \pm 29$ granos/m² y $a = 0.029 \pm 0.004$ m y $\beta = 0.22$.

La expresión B.7 es la ecuación que utilizamos en este trabajo para comprobar el flujo en las simulaciones.

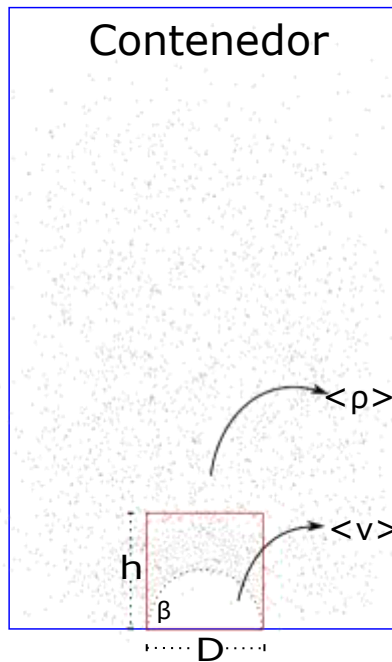


Figura B.1: Esquema en la salida del silo. Existe la formación de un arco proporcional al tamaño del orificio de la salida (p. ej. si el arco es semicircular, el valor de $\beta = 0.5$). Se muestra que el sistema tiene una densidad promedio. La velocidad que experimentan las partículas en la salida es de caída libre. D es el tamaño del orificio y h es la distancia que recorre el contenido para salir del silo.

Momento magnético

Para conocer el momento magnético entre dos imanes usamos discos de neodimio de diámetro de 5 mm con un grosor de 3 mm y una masa de 0.4 g. Los datos que proporciona el proveedor de los imanes no se ajustan a nuestros requerimientos, es decir, el proveedor no proporciona información del valor del momento magnético entre dos imanes. Por lo cual realizamos el siguiente experimento para obtener un valor aproximado del momento magnético entre dos imanes:

Realizamos el experimento con una balanza y un soporte vertical (como se observa en la Fig. C.1). Para evitar la interacción entre la base metálica y el imán, adherimos una placa aislante de acrílico entre ambos. El imán está fijo en la placa aislante y ésta a su vez a la balanza. De esta manera evitamos que por la fuerza de repulsión que se produce al reducir la distancia, el imán se mueva o se dé vuelta. Por otro lado, en la base vertical fijamos un picómetro con el que variamos la distancia entre los dos imanes, en el que adherimos un segundo imán. Alineamos los imanes y los acercamos; de esta manera medimos las variaciones del peso como función de la distancia.

El experimento se realiza por quintuplicado y los valores de la distancia y el promedio del peso se muestran en la tabla C.1.



Figura C.1: Fotografía del experimento para obtener el momento magnético entre dos imanes.

h (mm)	(peso)
33	0
23	0.44
18	1.42
13	5.46
12	7.46
11	10.46
10.5	12.52
10	15.12
9.5	18.46
9	22.58
8.5	27.72
8	34.42
7.5	43.08
7	54.16
6.5	69.4
6	88.94
5.5	113.88
5	145.38

Tabla C.1: Valores del peso para calcular el momento magnético.

Los pasos que realizamos para obtener el momento magnético son los siguientes:

1. Se grafican los datos y se ajustan a una función del orden de la fuerza de repulsión que se utiliza en el programa DEMDySiGMa (véase Fig. C.2).

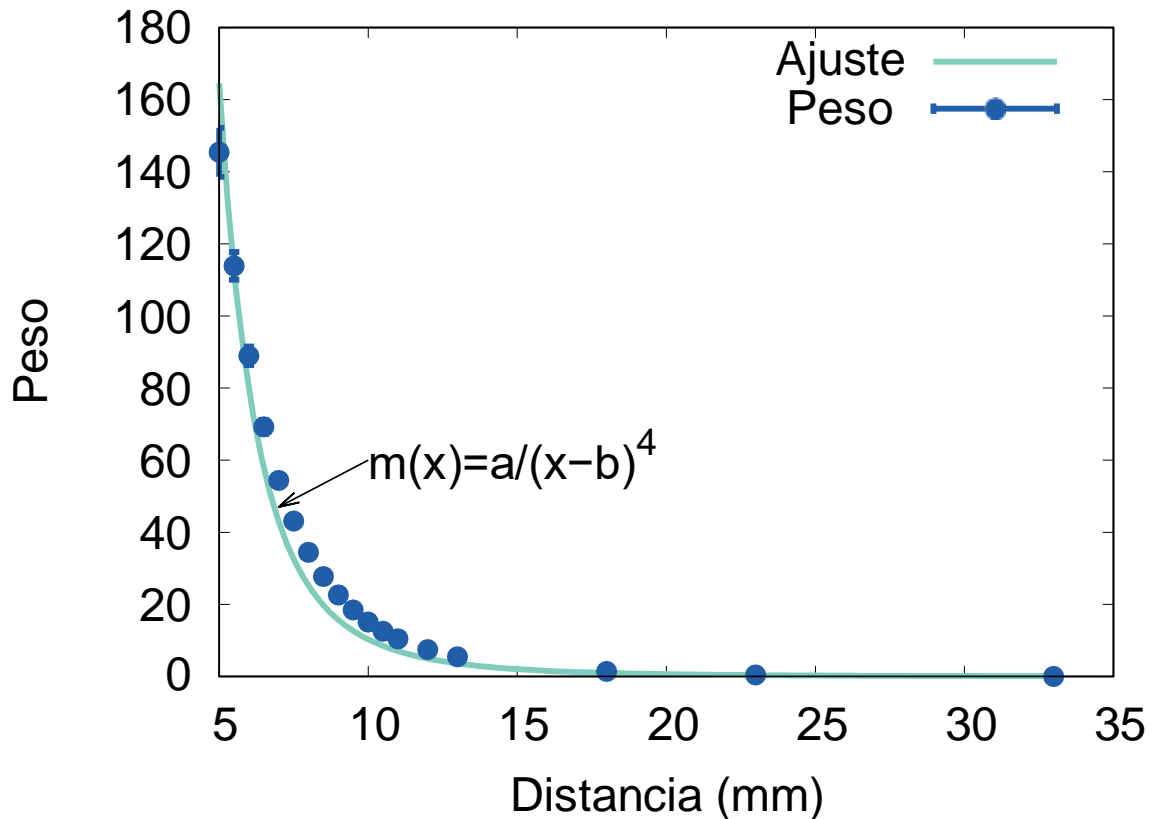


Figura C.2: Peso como función de la distancia. Los puntos son los datos experimentales con barras de error. Línea continua ajuste con la ecuación $a/(x - b)^4$.

2. Se realiza la conversión de unidades y se ajusta de forma lineal los datos para obtener el momento magnético.

Se linealizan los nuevos datos mediante el logaritmo neperiano. Del ajuste lineal se obtiene la pendiente y la ordenada en el origen, cuyos valores son $B = -4.016$ y $A = \ln(a) = -20.4459$ respectivamente.

3. Se realiza el gráfico de los logaritmos. El ajuste lineal se muestran en la Fig. C.3.

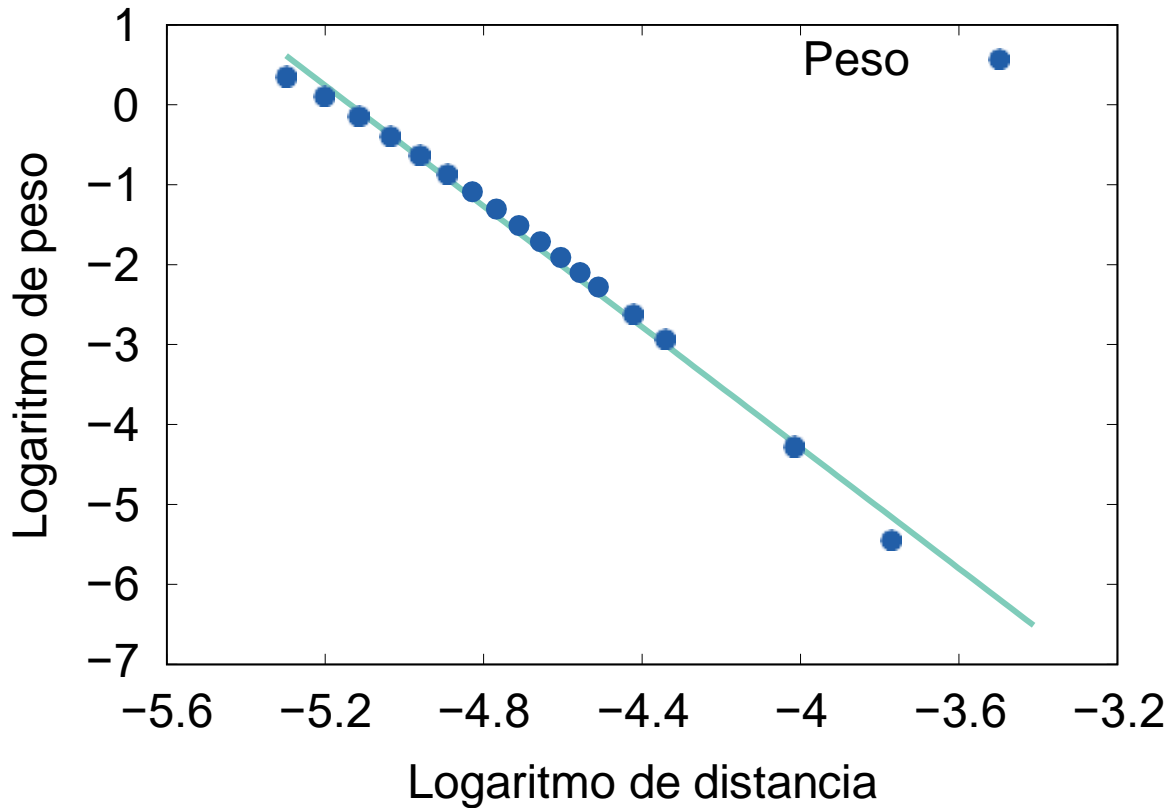


Figura C.3: Gráfico del $\ln(P)$ vs el $\ln(x)$. La línea recta representa el ajuste lineal $\ln(P) = \ln(a) + B \ln(x)$. Los puntos son los pesos obtenidos experimentalmente.

La ecuación de la regresión lineal tiene la forma:

$$\ln(P(x)) = \ln(a) - B \ln(x), \quad (\text{C.1})$$

donde x es la distancia, $\ln(a)$ es la ordenada al origen y B es la pendiente.

Se despeja P de la ecuación C.1.

$$P = \frac{e^A}{e^{\ln(x^B)}} = \frac{1.3196 * 10^{-9} \text{N m}^4}{x^4}, \quad (\text{C.2})$$

utilizamos el valor de 4 para la pendiente.

Para obtener el valor del momento magnético se utiliza la ecuación C.2 y se iguala con la ecuación C.3:

$$\vec{F}(r, \theta) = \frac{3\mu M^2}{4\pi r^4} \sum (1 - 3 \cos^2 \theta) \hat{r} + \sin 2\theta \hat{\theta}, \quad (\text{C.3})$$

donde μ_0 es la permeabilidad magnética en el vacío y M es el momento magnético, $\theta = 180^\circ$. La ecuación C.3 es análoga a la ecuación que describe la repulsión dipolo-dipolo magnético en nuestro sistema (Ec. 2.6), pero reescrita en términos de la distancia y el ángulo entre los dipolos magnéticos.

La ecuación C.3 se reduce a $\vec{F}(r) = \frac{3\mu_0 M^2}{2}$ (si los momentos magnéticos son paralelos). Así se obtiene la expresión:

$$\frac{\vec{F}(r) = P(r)}{1.3196 \cdot 10^{-9}} = \frac{3\mu_0 M^2}{2\pi r^4}, \quad (C.4)$$

$x = r$, se despeja M :

$$M = \sqrt{\frac{2\pi * 1.3196 * 10^{-9}}{3\mu_0}}, \quad (C.5)$$

se sustituye el valor de $\mu_0 = 4\pi * 10^{-7} \text{N A}^{-2} = 12.5663 * 10^{-7} \text{N A}^{-2}$:

$$m = \sqrt{2.192826 * 10^{-3}} = 0.046827. \quad (C.6)$$

4. Se realiza el análisis dimensional:

Usando las dimensiones de la ecuación C.6 se obtiene:

$$M = \sqrt{\frac{\text{N m}^4}{\text{N A}^{-2}}} = 0.046827 \text{ A m}^2. \quad (C.7)$$

Existe otra forma de obtener un valor aproximado del momento magnético entre dos imanes y es por medio de una calculadora en línea (por *internet*) aunque no cualquier calculadora es confiable, porque se determinan la fuerza de atracción basada en un cálculo teórico de la densidad de flujo. Con algunas suposiciones, la densidad de flujo (en Gauss) puede estar relacionada con la fuerza de atracción esperada. Desafortunadamente, esta simplificación a menudo no coincide con los datos medidos experimentalmente, por lo cual optamos por tomar el valor calculado por medio de experimentos.

Referencias

- [1] Lumay G., Schockmel J., Henández-Enríquez D., Dorbolo S., Vandewalle N., y Pacheco-Vazquez F., *Pap. Phys.* **7**, 0 (2015).
- [2] Ruiz-Suárez J., *Rep. Prog. Phys.* **76**, 066601 (2013).
- [3] Darias J., *Acta Cient. Venez.* **65**, 62 (2014).
- [4] Duran J., Reisinger A., y de Gennes P., *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials*, Springer New York, 2012.
- [5] Coulomb C., *Mem. Acad. Sci.* (1773).
- [6] Rossing T. D., *Am. J. Phys.* **50**, 271 (1982).
- [7] Faraday M., *Phil. Trans.* **121**, 299 (1831).
- [8] Rankine W. M., *Phil. Trans.* **147**, 9 (1857).
- [9] Geng J., Howell D., Longhi E., Behringer R., Reydellet G., Vanel L., Clément E., y Luding S., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 035506 (2001).
- [10] Glez J. H. C., Almeraya F., Almaral J. L., Calderón J. A., y Terrazas A. B., *Scientia et Technica* **1** (2007).
- [11] Mueth D. M., Jaeger H. M., y Nagel S. R., *Phys. Rev. E.* **57**, 3164 (1998).

REFERENCIAS

- [12] Vallejo L. E., Lobo-Guerrero S., y Chik Z., *A network of fractal force chains and their effect in granular materials under compression*, Springer, 2005.
- [13] Ciamarra M. P., Lara A. H., Lee A. T., Goldman D. I., Vishik I., y Swinney H. L., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 194301 (2004).
- [14] Majmudar T. S. y Behringer R. P., *Nature* **435**, 1079 (2005).
- [15] Vargas W. L. y McCarthy J., *AIChE J.* **47**, 1052 (2001).
- [16] Vargas W. L. y McCarthy J. J., *Phys. Rev. E.* **76**, 041301 (2007).
- [17] Batchelor G. K. y O'Brien R., *Proc. R. Soc. Lond. A* **355**, 313 (1977).
- [18] Huetter E., Koemle N., Kargl G., y Kaufmann E., *J. Geophys. Res. Planets* **113** (2008).
- [19] Falcon E. y Castaing B., *Powders and Grains* , 323 (2005).
- [20] Roberts I., *Proc. R. Soc.* **147**, 9 (1857).
- [21] Janssen H., *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure* **39**, 1045 (1895).
- [22] Sperl M., *Granul. Matter* **8**, 59 (2006).
- [23] Reynolds O., *Lond. Edinb. Dubl. Phil. Mag.* **20**, 469 (1885).
- [24] Garcimartín A., Pastor J., Ferrer L., Ramos J., Martín-Gómez C., y Zuriguel I., *Phys. Rev. E.* **91**, 022808 (2015).
- [25] Wang P., Zhu L., y Zhu X., *Powder Technol.* **295**, 104 (2016).
- [26] Wójcik M., Tejchman J., y Enstad G. G., *Powder Technol.* **222**, 15 (2012).
- [27] Choi J., Kudrolli A., y Bazant M. Z., *J. Phys. Condens. Matter* **17**, S2533 (2005).
- [28] Janda A., Zuriguel I., y Maza D., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 248001 (2012).
- [29] Zuriguel I., Garcimartín A., Maza D., Pugnaloni L. A., y Pastor J., *Phys. Rev. E.* **71**, 051303 (2005).

- [30] Darve F. y Laouafa F., *Mech. Cohes-Frict. Mat* **5**, 627 (2000).
- [31] Pacheco-Vázquez F., Caballero-Robledo G., Solano-Altamirano J., Altshuler E., Batista-Leyva A., y Ruiz-Suárez J., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 218001 (2011).
- [32] Jakšić Z., Vrhovac S., Panić B., Nikolić Z., y Jelenković B., *Eur. Phys. J. E* **27**, 345 (2008).
- [33] Ottino J. y Khakhar D., *Annu. Rev. Fluid Mech.* **32**, 55 (2000).
- [34] Makse H. A., Johnson D. L., y Schwartz L. M., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4160 (2000).
- [35] Mankoc C., Janda A., Arevalo R., Pastor J., Zuriguel I., Garcimartín A., y Maza D., *Granul. Matter* **9**, 407 (2007).
- [36] Hutter K. y Rajagopal K., *Continuum Mech. Therm.* **6**, 81 (1994).
- [37] Sakaguchi H., Ozaki E., y Igarashi T., *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 1949 (1993).
- [38] Qiu J., Ju D., Zhang J., y Xu Y., *Powder Technol.* **314**, 218 (2017).
- [39] González-Montellano C., Gallego E., Ramírez-Gómez Á., y Ayuga F., *Comput. Chem. Eng.* **40**, 22 (2012).
- [40] Balevičius R., Kačianauskas R., Mroz Z., y Sielamowicz I., *Adv. Powder Technol.* **22**, 226 (2011).
- [41] Qiu J., Xu Y., Zhang J., y Ju D., *DEM Simulation of Particle Flow in a Parallel-Hopper Bell-Less Blast Furnace Charging Model*, 2016.
- [42] Bertrand F., Leclaire L.-A., y Levecque G., *Chem. Eng. Sci.* **60**, 2517 (2005).
- [43] Sun W., Xue W., Zhang Y., y Wang L., *Int. J. Pavement Res. and Technol.* (2017).
- [44] Arsenović D., Vrhovac S., Jakšić Z., Budinski-Petković L., y Belić A., *Phys. Rev. E.* **74**, 061302 (2006).
- [45] Zhao D., Nezami E. G., Hashash Y. M., y Ghaboussi J., *Eng. Computation* **23**, 749 (2006).

REFERENCIAS

- [46] Beverloo W. A., Leniger H. A., y Van de Velde J., *Chem. Eng. Sci.* **15**, 260 (1961).
- [47] Hinrichsen H. y Wolf D. E., *The physics of granular media*, John Wiley & Sons, 2006.
- [48] Lumay G. y Vandewalle N., *Phys. Rev. E* **78**, 061302 (2008).
- [49] Chien C., *J. Appl. Phys.* **69**, 5267 (1991).
- [50] To K., Lai P.-Y., y Pak H., *Physical review letters* **86**, 71 (2001).
- [51] Aguirre M. A., Grande J. G., Calvo A., Pugnaroni L. A., y Géminard J.-C., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 238002 (2010).
- [52] Aguirre M. A., Grande J. G., Calvo A., Pugnaroni L. A., y Géminard J.-C., *Phys. Rev. E* **83**, 061305 (2011).
- [53] Griffiths D. J., *Introduction to electrodynamics*, Prentice Hall New Jersey, 1962.
- [54] Solano-Altamirano J., Caballero-Robledo G., Pacheco-Vázquez F., Kamphorst V., y Ruiz-Suárez J., *Phys. Rev. E* **88**, 032206 (2013).
- [55] Stickler B. A. y Schachinger E., *Basic concepts in computational physics*, Springer, 2016.
- [56] Serway R. A., Jewett J. W., Hernández A. E. G., y López E. F., *Física para ciencias e ingeniería*, Thomson, 2005.