



Universidad de Navarra

Facultad de Ciencias

**Dinámica microscópica en la descarga de silos y
redes de fuerza en un medio granular rígido.**

Roberto Arévalo Turnes

Servicio de Publicaciones de la Universidad de Navarra

ISBN 84-8081-074-2



Universidad de Navarra

Facultad de Ciencias

**Dinámica microscópica en la descarga de silos y
redes de fuerza en un medio granular rígido.**

Memoria presentada por **D. Roberto Arévalo Turnes** para aspirar al grado de Doctor por la Universidad de Navarra.

El presente trabajo ha sido realizado bajo mi dirección en el Departamento de Física y Matemática Aplicada y autorizo que sea presentado ante el Tribunal que lo ha de juzgar.

Pamplona, 15 de marzo de 2009

Dr. Diego Maza Ozcoidi

Declaración:

Por la presente yo, **D. Roberto Arévalo Turnes**, declaro que esta tesis es fruto de mi propio trabajo y que en mi conocimiento, no contiene ni material previamente publicado o escrito por otra persona, ni material que sustancialmente haya formado parte de los requerimientos para obtener cualquier otro título en cualquier centro de educación superior, excepto en los lugares del texto en los que se ha hecho referencia explícita a la fuente de la información.

De igual manera, autorizo al Departamento de Física y Matemática Aplicada de la Universidad de Navarra, la distribución de esta tesis y, si procede, de la “fe de erratas” correspondiente por cualquier medio, sin perjuicio de los derechos de propiedad intelectual que me corresponden.

Pamplona, 15 de marzo de 2009

D. Roberto Arévalo Turnes

© Roberto Arévalo Turnes

Derechos de edición, divulgación y publicación:

© Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra

A mi familia,

Agradecimientos

La decisión de empezar esta tesis la tomé por el entusiasmo que Diego Maza, mi director, mostró, y me contagió, por un trabajo personal que yo había realizado. Si, cuatro años y medio después, he logrado acabarla es en buena medida por su estímulo y apoyo para culminar un trabajo que, en sus aciertos, quiero considerar conjunto, y del que me adjudico todas las deficiencias. Realizar un trabajo numérico en el seno de un grupo experimental puede no ser una decisión óptima desde el punto de vista científico o profesional, pero éstos no son los únicos aspectos relevantes en cuatro años de una vida, y yo me considero afortunado de haber realizado la tesis con Diego. De sus conocimientos, su entusiasmo y su capacidad para escucharme y confiar en mi trabajo, he aprendido mucho, y no sólo de física o de medios granulares.

Por supuesto, en este viaje, he tenido más compañeros. Los más cercanos, los miembros del grupo de medios granulares Ángel Garcimartín, Iker Zuriguel, José Martín Pastor, Cristian Manco, Álvaro Janda. Ha sido genial trabajar con vosotros, y en el tiempo que llevo fuera he echado de menos los cafés, las reuniones de los martes en el departamento y las de cualquier otro día fuera de la universidad.

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

A Luis Pugnaroni le debo un agradecimiento especial, y quiero acordarme de él, por acogerme en La Plata, porque trabajar con él siempre es productivo y porque es un tipo estupendo. Gracias por todo, Luis. También quiero agradecer a todos los miembros del Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (La Plata, Argentina) dirigido por el Dr. Raúl Grigera su amable acogida durante el mes de noviembre de 2005. Y a Fernando Vericat, Luis Pugnaroni, Lucas Valluzzi y Marcos Valluzzi con quienes trabajé estupendamente e hicieron, además, mi estancia en la ciudad muy agradable.

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

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

A mis padres, que han sobrellevado sin regañarme demasiado mis prolongadas ausencias de Madrid, y a Sabi y Nerea les agradezco su ayuda y sus muestras de confianza, apoyo e ilusión por mi trabajo.

Grande es mi vanidad, diréis,
creyendo a mi trabajo digno de la atención ajena
y acusándoos de no querer la vuestra darle.
Ahí tendréis razón. Mas el trabajo humano
con amor hecho, merece la atención de los otros, ...

Luis Cernuda.

Índice general

Prólogo	xiii
1 Introducción	1
1.1 Medios granulares diluidos.	2
1.2 Medios granulares densos.	4
1.3 Medios granulares estáticos.	8
2 Métodos numéricos.	25
2.1 Dinámica molecular de partículas blandas.	25
2.1.1 Fuerzas de interacción.	26
2.1.2 Integración de las ecuaciones de movimiento.	28
2.1.3 Implementación eficiente.	30
2.1.4 Comentarios finales.	32
2.2 Métodos numéricos en la literatura granular.	32
2.2.1 Dinámica Molecular de partículas duras.	33
2.2.2 Dinámica de contactos.	33
2.2.3 Método de Monte Carlo.	34
2.2.4 Autómatas celulares.	35
3 Flujo y fluctuaciones.	37
3.1 Introducción.	37
3.2 Flujo estacionario.	37
3.2.1 Flujo resuelto en el tiempo.	38
3.2.2 Densidad en la región fluidizada.	40
3.3 Fluctuaciones.	43
3.3.1 Perfiles de velocidad y densidades de probabilidad.	43
3.3.2 Inicio de la descarga.	47
3.3.3 Interpretación microscópica.	49
4 Arcos en depósitos granulares.	51
4.1 Arcos.	51
4.2 Protocolo de identificación de arcos.	51
4.3 Resultados en lechos agitados verticalmente.	55
4.4 Propiedades de los arcos.	57
4.5 Arcos en configuraciones estáticas.	59

5	Redes de fuerzas en medios granulares.	63
5.1	Compresión isotrópica.	63
5.2	Propiedades de la red de fuerzas.	66
5.2.1	Conectividad.	67
5.2.2	Número de nodos y tamaño del componente gigante.	69
5.2.3	Distancia geodésica media y diámetro de la red.	69
5.2.4	Propiedades de los grupos.	70
5.2.5	Dimensión fractal.	72
5.2.6	Polígonos.	73
5.2.7	Subredes en la red de contactos.	75
5.3	Transición al estado rígido.	76
5.3.1	Topología de la red de fuerzas del sistema compactado.	76
5.3.2	Evolución de la topología en la transición.	78
6	Conclusiones y perspectivas	83

Prólogo

Un medio granular [1] está constituido por un conjunto de partículas de tamaño macroscópico que interactúan mediante fuerzas de contacto disipativas. A los constituyentes del medio se les suele llamar, genéricamente, granos y su rango de tamaños va desde décimas o centésimas de milímetros, en los polvos, hasta centímetros o metros en aplicaciones industriales o estudios geológicos. El tipo de interacciones a considerar puede variar al considerar tan amplio rango. Así, en polvos como el tóner las fuerzas electrostáticas son muy importantes. También es necesario tener en cuenta el efecto atractivo de la humedad en granos de pequeño tamaño, aproximadamente inferior a un milímetro. Un medio granular seco es aquél en el que sólo se dan fuerzas de contacto repulsivas. Esto puede ser debido a que las interacciones a distancia o la humedad no están presentes, o a que se pueden considerar despreciables. En el presente trabajo se tratarán únicamente medios granulares secos.

El interés de los medios granulares es a la vez práctico y fundamental. Los medios granulares ocupan un lugar prominente en muchos procesos industriales. Se encuentran como productos de las explotaciones mineras y canteras; son materiales básicos en la construcción, en forma de arena y grava para formar cemento o asfalto. En la industria farmacéutica se manipulan granos de diverso tamaño para producir pastillas, grageas o cápsulas que, a su vez, son medios granulares. En agricultura encontramos las semillas, granos de cereal o legumbres secas; todos ellos aglomerados de constituyentes macroscópicos que es necesario apilar, transportar o mezclar. Se estima que, tras la del agua, la manipulación de medios granulares, de uno u otro tipo, es la actividad humana más importante [1].

Desde el punto de vista fundamental, los medios granulares presentan características que son peculiares y los diferencian de otros sistemas bien conocidos. Al ser sistemas atórmicos, no se les pueden aplicar razonamientos basados en la termodinámica, a menos que se introduzcan modificaciones como temperaturas efectivas.

Cuando la materia se presenta en forma granular exhibe, por tanto, propiedades y comportamientos que requieren nuevos conceptos, más allá de la termodinámica y la física estadística clásicas. Este interés científico junto con su ubicuidad e importancia práctica, ha motivado el estudio de los medios granulares desde mucho tiempo atrás. Así, Michael Faraday [2] estudió en 1831 la formación de pilas en la superficie de depósitos de arena vibrados verticalmente. Este ha sido un efecto muy discutido hasta que recientemente se ha comprendido el papel que juega el aire [3]. William Rankine [4] estudió la fricción en medios granulares en 1857 basándose en las ideas de Coulomb. El conocido “efecto Janssen” consiste en la saturación de la presión en el interior de un silo, de modo que cerca de la superficie la presión aumenta linealmente para, a partir de cierta profundidad, permanecer constante. Este efecto fue descrito por primera vez en 1884 por Isaac Roberts [5] y analizado teóricamente por Heinrich Janssen en 1895 [6]. Janssen se dio cuenta de que la fricción de los granos contra la pared puede sujetar el material, haciendo que no haya una presión adicional hacia las capas inferiores del medio.

La “dilatancia” de Reynolds [7] es una propiedad fundamental de los medios granulares que fue puesta de manifiesto por Osborne Reynolds en 1885. Consiste en el hecho de que un medio granular compactado se dilata, necesariamente, cuando es deformado. Esta propiedad es fácil de observar en una playa, cuando al caminar sobre arena húmeda se nota que se seca al pisarla. Esto ocurre porque al pisar la arena, que está compactada, se deforma. Previamente, por tanto, hay una dilatación, un aumento de volumen, que ocasiona que el agua se absorba de la superficie y ésta aparezca seca.

A lo largo del siglo veinte el desarrollo del conocimiento en medios granulares se asocia con el trabajo de ingenieros, debido a su importancia práctica. En 1954, tras años de observaciones en el desierto, Ralph Bagnold [8] propuso la hipótesis según la cual el esfuerzo de corte en un medio granular es proporcional al cuadrado de la tasa de deformación, en lugar de lineal. Es lo que en la actualidad se denomina régimen de Bagnold.

En las últimas décadas el interés de la comunidad de físicos en los medios granulares se ha visto acrecentado por la oportunidad que ofrecen de estudiar un sistema complejo, fuera del equilibrio. La oportunidad de usar y desarrollar herramientas de campos tan diversos como la física estadística, mecánica de fluidos o elasticidad, ha provocado una avalancha de trabajos orientados a la comprensión de los medios granulares. El uso de métodos numéricos para extraer las consecuencias de los modelos, y compararlas con los experimentos, ha visto un gran desarrollo y son una herramienta fundamental en un campo complejo en el que el avance puramente analítico no siempre es posible.

El presente trabajo es un estudio de los medios granulares en dos dimensiones mediante técnicas numéricas. Se aborda el análisis de dos regímenes muy distintos, pero relacionados. En primer lugar se estudia el régimen de flujo denso. Los medios granulares a baja densidad pueden analizarse empleando la teoría cinética de gases y líquidos, estando la comprensión del régimen diluido muy adelantada, al contrario de lo que ocurre en el estado de flujo denso. Cuando un medio granular fluye a elevada densidad los contactos son casi permanentes, en vez de instantáneos, y la tasa de disipación es muy elevada. Este escenario no puede abordarse mediante una teoría general, a día de hoy. Se dispone, en cambio, de amplia información experimental en geometrías concretas que pueden ser descritos fenomenológicamente. En la falta de un marco teórico para el flujo denso es donde radica su interés. En este trabajo se estudia la descarga por gravedad de un silo como sistema típico. Se presentarán resultados a escala macroscópica del flujo de masa que se compararán con resultados experimentales. El movimiento de los granos será estudiado en detalle y analizado en el marco de un modelo difusivo.

Cuando el orificio de salida de un silo es similar al tamaño de los granos que contiene, el flujo presenta intermitencias y puede llegar a obstruirse. Este fenómeno se debe a la formación de un arco en la salida del silo, un conjunto de granos que se sostienen a sí mismos contra la gravedad. Los arcos pueden formarse, también, dentro del silo en reposo, determinando la densidad del material en el interior así como la distribución de fuerzas. Utilizando una definición geométrica de arco, en este trabajo se estudian propiedades de los arcos que se relacionan con características de un depósito granular como son su fracción de compactación: volumen ocupado por los granos respecto del volumen total del depósito; y número de coordinación: número medio de contactos de los granos.

La presencia de fuerzas de fricción hace que la definición geométrica de arco sea insuficiente para capturar todas las estructuras presentes en un medio granular estático. Debe tenerse en cuenta la distribución de las fuerzas en el seno del material. En los últimos años la noción de “cadenas de fuerza” se ha hecho popular al notarse, visualmente, la presencia de estructuras

filamentosas en la distribución espacial de las fuerzas intergranulares. Desafortunadamente, no ha emergido una definición unificada de “cadena de fuerza” por lo que su utilidad como herramienta es limitada. Esto ha motivado que en el presente trabajo se aborde un estudio más abstracto, sin introducir definiciones que puedan variar de un autor a otro. Para ello, un depósito granular se concebirá como un grafo en el que cada grano es un nodo y cada contacto una arista. Este grafo puede ser analizado mediante las técnicas del campo de las redes complejas. Se obtiene de esta manera una caracterización del medio granular basada en propiedades topológicas. Estas propiedades pueden analizarse en función de la magnitud de la fuerza presente en cada contacto, revelando características de la distribución de fuerzas en un depósito granular.

La topología del medio granular, concebido como una red de contactos, resulta útil para tratar de comprender la transición de un sistema en flujo denso (o diluido) a uno estático. Para simplificar la complicación que introduce la gravedad, en este trabajo se estudia dicha transición en un sistema de cuatro paredes móviles que comprimen un conjunto de granos en posición horizontal. La topología de la red se altera al producirse la transición a un sistema atascado, que se identificará mediante técnicas aceptadas en la literatura como la forma de la distribución de fuerzas en el depósito. En el presente trabajo se propone usar las características de la red de contactos para explicar la rigidez que caracteriza al estado final.

El resto de este trabajo está dispuesto del siguiente modo. La introducción expone con más detalle las propiedades de los medios granulares con hincapié en los aspectos estudiados en el resto de capítulos. Los antecedentes más cercanos del trabajo realizado se discuten también en la introducción. El segundo capítulo repasa los métodos numéricos más relevantes en la literatura de medios granulares y discute en detalle el método de dinámica molecular que se ha usado en este trabajo. El capítulo tercero está dedicado al análisis del flujo en silos y del movimiento de los granos en su interior. En el capítulo cuarto se estudian las propiedades de los arcos que se forman en medios granulares estáticos depositados por gravedad y, en el capítulo quinto, se exponen y analizan las propiedades topológicas del medio granular como red de contactos. Este último análisis se efectúa en un medio estático y en un sistema que experimenta una transición fluido-sólido. Finalmente, el capítulo de conclusiones resume las contribuciones realizadas en perspectiva con los trabajos previos. También se señalan las posibles futuras líneas de investigación.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se expondrán las propiedades más relevantes de los medios granulares así como los conceptos que se usarán a lo largo del presente trabajo.

El carácter macroscópico de los granos y la disipación presente en las colisiones, es el origen de comportamientos peculiares de los medios granulares que los distinguen de otros medios mejor comprendidos como los fluidos. Por ejemplo, una esfera de aluminio de 1mm de radio que se mueve a una velocidad de 1cm/s tiene una energía cinética es de unos 10^{-10} J, mientras que la energía térmica, suponiendo una temperatura del entorno de unos 25°C , será de 10^{-21} J. Así, la temperatura de un medio granular es esencialmente cero, es lo que se denomina un sistema atómico, y no puede ser descrito en términos de un movimiento browniano.

La dinámica de los medios granulares es dependiente de la historia. En efecto, si el sistema sigue una trayectoria en el espacio de configuraciones que lo mantiene a alta densidad, habrá muchas colisiones y mucha disipación. El estado final puede ser completamente diferente si el sistema se hubiese mantenido a una densidad baja, dando poco lugar a la disipación mediante colisiones. Como ejemplo, considérese el llenado de un silo. Si se vierte el material lentamente, el medio estará muy diluido y cada grano tendrá pocos vecinos. En estas condiciones, cada partícula experimenta colisiones sucesivas en las que va perdiendo energía, pero que le permiten explorar un espacio relativamente amplio antes de llegar a detenerse. Se conseguirá así un llenado relativamente compacto. En cambio, si el material se vierte de golpe o muy rápidamente, habrá una alta densidad y cada partícula experimentará múltiples choques prácticamente instantáneos. En este caso, la energía se pierde muy rápidamente sin que haya posibilidad de explorar el espacio de fases. El material del silo estará menos compacto que en el primer caso. Las fluctuaciones de densidad, la presencia de arcos y la distribución de fuerzas serán diferentes en uno y otro caso.

La disipación de energía en los choques también introduce correlaciones en los movimientos de las partículas. Así, cuando dos granos colisionan, la disipación provoca que el ángulo de salida de las partículas sea menor que el que formaban al colisionar, dando lugar a la alineación de trayectorias. Este mecanismo explica la formación de vórtices en los gases granulares.

Los mecanismos de disipación de energía en un choque incluyen la deformación o rotura de las pequeñas irregularidades en la superficie de los granos; la deformación permanente de las partículas, o la propagación de fonones en el interior de las mismas. Para que la evolución del sistema no se detenga es necesario proveerlo constantemente de energía, de modo que los medios granulares son sistemas fuera del equilibrio.

1.1 Medios granulares diluidos.

Se denomina “gas granular” a un medio granular a baja densidad en el que los contactos entre partículas no son permanentes. Tal sistema se asemeja a los gases y líquidos estudiados en la teoría cinética, salvo la inelasticidad de las colisiones. El éxito del modelo de esferas duras como base de la teoría cinética y la hidrodinámica ha motivado su aplicación a los medios granulares con flujos rápidos y densidades moderadas. Para ello, se introduce en el modelo un parámetro que caracteriza la inelasticidad de las colisiones, el coeficiente de restitución α , que es igual a la unidad para un líquido ideal.

Enfriamiento homogéneo.

Un fluido homogéneo aislado alcanza un estado de equilibrio con un baño térmico a temperatura T caracterizado por la función de distribución de velocidades de Maxwell. Para un medio granular, en cambio, no existe tal estado de equilibrio. Debido a la inelasticidad de las colisiones, la temperatura, definida a partir de la energía cinética, decrece monótonamente. Debe tenerse presente no obstante, que los medios granulares son sistemas fuera del equilibrio y la temperatura que se menciona no es la misma que en termodinámica, y no está claro, por tanto, que tenga sus mismas propiedades. La temperatura que se usa en estas descripciones es, más bien, un parámetro proporcional a la energía cinética que resulta conveniente. Cuando la dependencia de todas las distribuciones ocurre a través de la temperatura de enfriamiento, el sistema se halla en estado de enfriamiento homogéneo. La temperatura cambia con el tiempo según la ley de Haff $T(t) = T(0)(1 + ct)^{-2}$ [9]. La función de distribución de velocidades se ha calculado de manera aproximada a partir de las ecuaciones de Boltzmann y la de Enskog [10], que introduce correcciones debidas al tamaño finito de las partículas. Contrastadas con cálculos numéricos, estas soluciones presentan un excelente acuerdo en el rango $0,3 < \alpha \leq 1$.

Se pueden obtener soluciones para mezclas binarias [11] y se observa entonces que cada especie está caracterizada por una temperatura parcial, siendo el cociente de las mismas una constante. Haff. En el caso de una partícula browniana (una partícula grande en un mar de partículas más pequeñas), la temperatura de ésta es menor que la del baño [12]. Estos efectos antiintuitivos son consecuencia de la inelasticidad de las colisiones y encuentran su explicación en la teoría cinética.

En sistemas lo suficientemente grandes se observa que el estado de enfriamiento homogéneo es inestable [13]. Los granos comienzan a agruparse y puede llegar a formarse un único agregado. También es posible la formación de vórtices. La aparición de inhomogeneidades va precedida de desviaciones de la ley de Haff en la temperatura, con la energía cinética media cayendo más lentamente. La descripción hidrodinámica de este escenario está en buen acuerdo con los cálculos numéricos cuando el flujo está dominado por los vórtices.

Un estudio muy completo del mecanismo de formación de agregados a través de la resolución numérica de la ecuación de Boltzmann, y la solución aproximada de las ecuaciones hidrodinámicas, se encuentra en [14]. La longitud de onda crítica se obtiene como función del coeficiente de restitución, observándose un acuerdo excelente con el análisis numérico en el rango $0,7 \leq \alpha \leq 0,9$.

Hidrodinámica.

Un estudio macroscópico puede iniciarse escribiendo las ecuaciones de conservación para los campos de densidad $n(\mathbf{r},t)$, velocidad de flujo $\mathbf{U}(\mathbf{r},t)$ y densidad de energía $T(\mathbf{r},t)$

$$D_t + n\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1.1)$$

$$D_t U_i + (mn)^{-1} \partial_j P_{ij} = 0, \quad (1.2)$$

$$D_t T + \frac{2}{3nK_B} (P_{ij} \partial_j U_i + \nabla \mathbf{q}) = -T\zeta, \quad (1.3)$$

donde $D_t = \partial_t + \mathbf{U} \cdot \nabla$. Estas ecuaciones son las mismas que describen el balance en fluidos normales, con la salvedad del miembro de la derecha en el balance de energía. El nuevo término procede de la inelasticidad de las colisiones $\zeta \propto (1 - \alpha^2)$ y corresponde a la tasa de enfriamiento $\zeta \propto \sqrt{T}$. Para que el sistema quede cerrado es necesario expresar la presión $P_{ij}(\mathbf{r}, t)$, el flujo de calor $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ y la tasa de enfriamiento en función de los campos hidrodinámicos mediante relaciones constitutivas. En el caso de un fluido elástico, pueden obtenerse las relaciones constitutivas mediante el método de Chapman-Enskog [10]. Asumiendo que las desviaciones de la distribución de equilibrio son pequeñas, se las trata como una perturbación. El estado de referencia (la distribución de equilibrio) se expande en una serie de potencias de gradientes pequeños de los campos hidrodinámicos. Al orden más bajo, las relaciones constitutivas que se obtienen, junto con las ecuaciones de balance, dan lugar a las familiares ecuaciones de Navier-Stokes.

La descripción hidrodinámica es posible debido a que los denominados modos hidrodinámicos decaen más lentamente que el resto, dominando por tanto el comportamiento del sistema a tiempos largos. Para que el método de Chapman-Enskog pueda ser adaptado a los medios inelásticos, la tasa de disipación tiene que ser menor que la tasa de decaimiento de los modos no hidrodinámicos [15].

A orden cero el método de Chapman-Enskog aplicado a la ecuación de Enskog de un medio inelástico da lugar a un escenario similar al de enfriamiento homogéneo, pero ahora el medio es inhomogéneo. Este estado se denomina estado de enfriamiento homogéneo local, donde el flujo de calor es nulo y la presión, hidrostática $P_{ij} = p\delta_{ij}$ e igual a la del estado homogéneo.

A primer orden las ecuaciones constitutivas son [16, 17]

$$P_{ij} = p\delta_{ij} - \eta(\partial_j U_i + \partial_i U_j - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla \cdot \mathbf{U}) - \gamma\delta_{ij}\nabla \cdot \mathbf{U}, \quad (1.4)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa\nabla T - \mu\nabla n, \quad (1.5)$$

$$\zeta = \frac{p - p^k}{p^k} \psi \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (1.6)$$

el tensor de presión es el mismo que en los fluidos normales, pero ahora las dos viscosidades dependen del coeficiente de fricción. El flujo de calor viene dado por la ley de Fourier con un término adicional que acopla el flujo de calor con el gradiente de la densidad. Finalmente, la disipación es proporcional a la divergencia del campo de velocidad.

La expansión de Chapman-Enskog se hace en torno a un estado de referencia. Si se toma como tal estado la distribución Maxwell, que es válida sólo para disipación débil, las soluciones estarán afectadas por esta misma limitación. Por otra parte, ya se ha comentado más arriba que la disipación incrementa las correlaciones. Puesto que tanto la ecuación de Boltzmann como la de Enskog hacen uso de la independencia estadística de las distribuciones de dos partículas, es de esperar que estas descripciones hidrodinámicas no sean válidas en escenarios de alta densidad y una fuerte disipación. Comparaciones de los resultados analíticos con los obtenidos por diversos métodos de cálculo numérico [18, 19], dan buenos acuerdos para coeficientes de restitución mayores que 0,6 y densidades inferiores a 0,5 (en unidades tales que el tamaño de los granos es la unidad).

Una limitación adicional de los resultados de la expansión de Chapman-Enskog reside en que los gradientes de los campos hidrodinámicos se toman pequeños. En situaciones en las que se puedan desarrollar gradientes grandes será preciso acudir a otros métodos para construir las soluciones.

1.2 Medios granulares densos.

Como se ha mencionado al final de la sección precedente, los resultados hidrodinámicos que se aplican a los gases granulares no son válidos en un régimen de alta densidad. En este escenario las colisiones binarias no determinan la dinámica, pues los granos pueden permanecer en contacto tiempos largos, rodando y deslizando entre sí. La falta de un marco teórico general ha motivado la proliferación de experimentos [20] en configuraciones concretas y modelos que se aplican en determinadas condiciones.

Recientemente se han propuesto algunas relaciones entre el esfuerzo tangencial τ y la presión P aplicables en presencia de esfuerzos de corte. La situación más simple es la de un medio granular entre dos placas paralelas que lo mantienen a una presión constante P . En [21, 22] se usa análisis dimensional y análisis numérico para mostrar que el esfuerzo de corte es proporcional a la presión

$$\tau = \mu(I)P. \quad (1.7)$$

El coeficiente de proporcionalidad $\mu(I)$ depende de un único parámetro

$$I = \frac{2\dot{\gamma}R}{\sqrt{P/\rho_s}} \quad (1.8)$$

denominado número inercial. Aquí $\dot{\gamma}$ es la tasa de corte (*shear rate*), R el radio de los granos y ρ_s la densidad de partículas. A partir de experimentos de flujos en planos inclinados se obtiene

$$\mu(I) = \mu_s + \frac{\mu_2 - \mu_s}{I_o/I + 1} \quad (1.9)$$

donde μ_s es el valor en ausencia de esfuerzo de corte y μ_2 el obtenido para valores altos de I ; I_o es una constante. Estas expresiones permiten obtener los perfiles de velocidad en configuraciones bidimensionales sencillas como planos inclinados o pilas.

Para situaciones tridimensionales más complejas se ha propuesto una generalización en la que el tensor de tensiones está dado por

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (1.10)$$

$$\tau_{ij} = \eta(|\dot{\gamma}|, P)\dot{\gamma}_{ij} \quad (1.11)$$

con

$$\eta(|\dot{\gamma}|, P) = \frac{\mu(I)P}{|\dot{\gamma}|} \quad (1.12)$$

$$(1.13)$$

$$I = \frac{2|\dot{\gamma}|R}{\sqrt{P/\rho_s}} \quad (1.14)$$

donde $\dot{\gamma}_{ij} = \partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i$ es el tensor de deformación y $|\dot{\gamma}| = \sqrt{\frac{1}{2}\dot{\gamma}_{ij}\dot{\gamma}_{ij}}$ su segundo invariante. La viscosidad efectiva η diverge a medida que la tasa de deformación tiende a cero.

Esto implica que existe un esfuerzo de corte límite por encima del cuál el medio comienza a deformarse y fluir. Estas expresiones han sido contrastadas con experimentos mostrando un buen acuerdo en el perfil de velocidades predicho. Aunque carentes de un marco teórico, el interés de todas estas expresiones es que apuntan a un posible nexo entre los medios granulares densos y los medios viscoplásticos, en los que se observa una reología similar.

Flujo microscópico en silos.

En este apartado se revisan los resultados experimentales y teóricos que se aplican al caso concreto del movimiento en el interior de un silo. En este sistema, el material depositado en el interior se descarga por la acción de la gravedad a través de un orificio practicado en su base. La tasa de descarga depende del tamaño del orificio y se pueden observar cambios de comportamiento en el sistema en función del mismo. Durante la descarga, el medio granular permanece en un estado de alta densidad con contactos prolongados entre los granos. Es, por ello, un sistema típico para estudiar las propiedades del flujo granular denso.

Históricamente se pueden destacar dos aproximaciones teóricas al problema como las más relevantes. Nedderman y Tüzün [23] usaron una descripción cinemática continua a finales de los setenta. Para ello asumieron que, cerca del orificio, la velocidad horizontal es proporcional al gradiente de la velocidad vertical

$$u = B \frac{\partial v}{\partial x} \quad (1.15)$$

donde u es la componente horizontal de la velocidad, v la vertical y x la coordenada horizontal. El parámetro B tiene dimensiones de longitud pero su significado físico no se puede deducir del presente modelo. La expresión Ec.(1.15) junto con la ecuación de continuidad dan la siguiente ecuación para la velocidad vertical

$$\frac{\partial v}{\partial z} = B \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (1.16)$$

donde z es la coordenada vertical. La solución de esta ecuación es un perfil gaussiano

$$v(x, z) = \frac{Q}{\sqrt{4\pi Bz}} \exp -x^2/4Bz \quad (1.17)$$

donde Q es el flujo volumétrico. Este perfil de velocidad se ajusta bien a los perfiles experimentales [24, 25] cuando el régimen de descarga es estacionario y no hay obstrucciones ni intermitencias. En tres dimensiones esto implica que el orificio de salida sea, al menos, cinco veces mayor que el tamaño de los granos.

Previamente se había introducido un modelo basado en la difusión de los granos en el interior del silo. Propuesto por primera vez por Litwiniszyn [26] y desarrollado por Mullins [27] este modelo considera que los granos están inicialmente dispuestos de forma ordenada. El proceso de descarga se modela considerando que se inyectan huecos por el orificio en la base del silo. Estos huecos difunden hacia la superficie libre del silo intercambiando posiciones con los granos que se desplazan, por tanto, hacia el orificio. Los granos se mueven a saltos cuya duración se asume dada por la que correspondería a una caída libre entre la posición inicial y final del salto.

La teoría de Mullins en estado estacionario da la siguiente relación entre los flujos horizontal y vertical de un sistema bidimensional o radialmente simétrico

$$J_x = B \frac{\partial J_z}{\partial x} \quad (1.18)$$

con

$$B = \frac{1}{2} \langle l_x^2 \rangle / \langle l_z \rangle \quad (1.19)$$

donde J_x es el flujo horizontal, J_z el vertical y l_x y l_z son las componentes horizontal y vertical, respectivamente, del salto. Formalmente, por tanto, el modelo cinemático y el difusivo son iguales pero en el último se tiene una interpretación física del parámetro que Nedderman y Tüzün introducirían *ad hoc*. El parámetro B puede ser tratado como una longitud de difusión y Mullins obtuvo un valor aproximado de $3/8$ del diámetro del grano.

En el detallado análisis llevado a cabo por Mullins se obtiene el perfil Ec.(1.17) en el caso de una fuente de huecos puntual. El perfil corresponde, por tanto, a un caso idealizado. Al considerar fuentes extendidas se obtiene una serie de la que la Ec.(1.17) es el término de orden cero. Este hecho debe tenerse en cuenta al comparar predicciones teóricas con resultados experimentales.

El parámetro B puede determinarse midiendo los perfiles de velocidad del flujo estacionario. Los valores obtenidos por Nedderman y Tüzün están entre 2 y 3 veces el diámetro de los granos, mayores, por tanto, que el valor predicho por el modelo difusivo. Experimentos más recientes [28] han puesto de manifiesto problemas adicionales en la imagen “microscópica” del modelo de Mullins. En primer lugar, la difusión de los granos en la componente horizontal es prácticamente nula, mientras que en la teoría de Mullins predice una difusión horizontal finita no nula. En los experimentos mencionados, la longitud de difusión asociada con el flujo es mucho mayor que la asociada con la mezcla. Además, se observan correlaciones en el movimiento de las partículas en distancias del orden de decenas de diámetro de grano. Estas correlaciones se ponen de manifiesto al observar que el número de vecinos de un grano se conserva durante un largo tiempo. Las funciones de distribución de los desplazamientos de los granos no son gaussianas a tiempos cortos, mostrando colas que decaen lentamente. Las distribuciones tienden a ser gaussianas sólo a tiempos largos.

Para explicar sus observaciones los autores del anterior estudio experimental han propuesto un nuevo modelo de difusión [29]. En el modelo de Mullins los huecos inyectados por el orificio intercambian posiciones con los granos, en el nuevo modelo, en cambio, el hueco esparce su volumen formando una “burbuja” que afecta a un conjunto de granos. Los granos efectúan pequeños movimientos cooperativos hacia abajo en el interior de la burbuja, que se mueve hacia la superficie del silo. Este modelo explicaría por qué la longitud de difusión, asociada con el movimiento de la burbuja, es mucho mayor que la de mezcla, asociada con los pequeños movimientos de los granos en el interior. En esta imagen es, también, natural que haya correlaciones en el movimiento de los granos.

Flujo macroscópico en silos.

En la sección precedente se ha analizado el flujo a la escala de los granos. En esta sección se estudia el flujo de masa obviando la constitución del medio. La cantidad de material descargado por unidad de tiempo es una magnitud de importancia práctica primordial, y los ingenieros se han esforzado en predecirla desde hace tiempo [30] en función de los parámetros del silo. Sin embargo, el comportamiento de la tasa de descarga en función del tamaño del orificio de salida es, además, una sonda de los procesos que tienen lugar en el seno del medio granular.

El resultado clásico es la denominada ley de Beverloo [31], cuya forma puede obtenerse mediante análisis dimensional si se supone que el flujo sólo depende del diámetro del orificio de salida, la densidad del medio y la gravedad.

El resultado experimental obtenido en [31] es

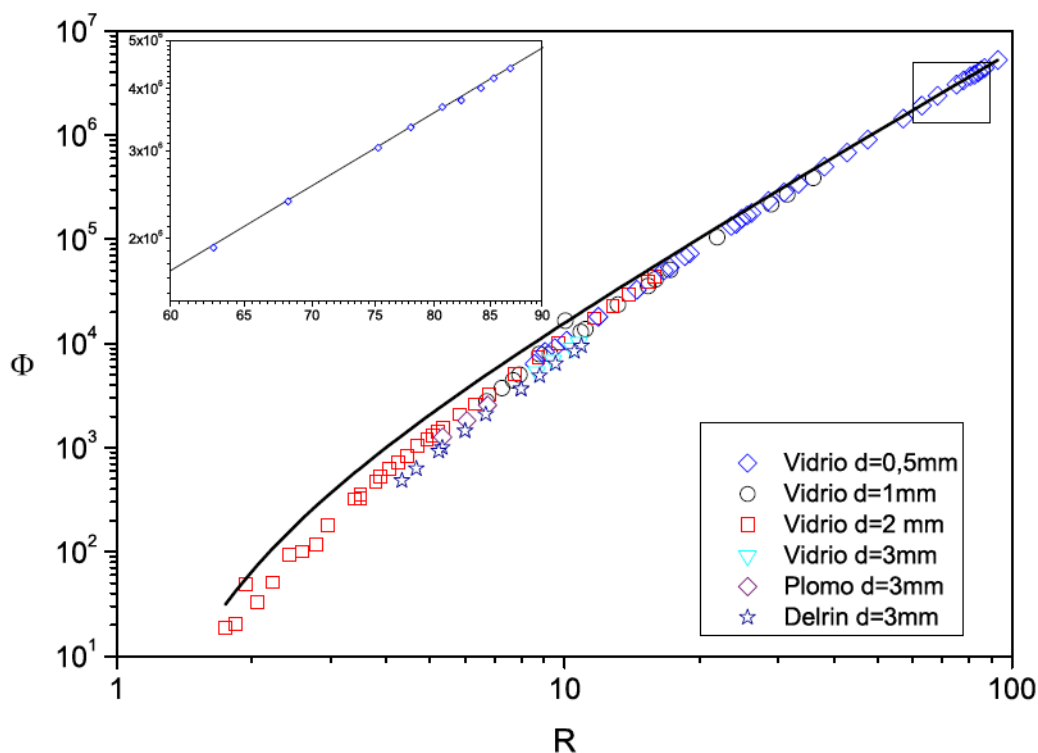


Figura 1.1: Flujo en un silo tridimensional a escala para diversos materiales y tamaños de granos esféricos. La línea continua es el mejor ajuste a la ley de Beverloo. Se puede comprobar que el ajuste es muy bueno para radios grandes (zona ampliada) pero no se pueden ajustar los radios pequeños. Figura cedida por C. Mankoc.

$$W(D) = C\sqrt{g\rho}(D - kd)^{5/2} \quad (1.20)$$

donde W es el flujo másico, D es el diámetro del orificio en la base del silo, d el diámetro de los granos, g es la gravedad, ρ es la densidad del medio, C es una constante que depende del medio y está relacionada con la fricción y k una constante. El valor del exponente es $5/2$ en tres dimensiones y $3/2$ en dos. La constante k está relacionada con la hipótesis del radio hidráulico, que afirma que, debido a su tamaño finito, los granos no caen por un orificio de tamaño D sino por un orificio de tamaño efectivo algo menor. El valor de la constante está en torno a 1,5 para muchos materiales, aunque alcanza el valor 2,9 para la arena. Para que la tasa de descarga sea independiente de la altura de llenado, esta debe ser mayor que unas dos veces el diámetro de la base.

La ley de Beverloo puede racionalizarse mediante la hipótesis del arco de caída libre. Esta afirma que existe una región, con forma aproximada de arco y altura proporcional al diámetro del orificio de salida, por encima de la cuál los granos están densamente empaquetados y sin libertad para moverse. Por debajo de esta región la densidad disminuye y los granos caen libremente constituyendo el flujo medido.

La ley de Beverloo funciona bien con orificios de salida grandes. Esto significa mayores que unas cinco veces el diámetro de un grano en tres dimensiones y mayores que unas nueve veces el tamaño de un grano en dos dimensiones [32]. Puede afirmarse, por tanto, que existen dos regímenes en el flujo de masa de un silo. Para orificios grandes el flujo es estacionario y uniforme.

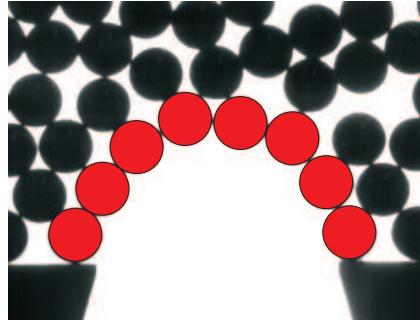


Figura 1.2: Formación de un arco en un silo bidimensional lleno de esferas. Imagen obtenida por A. Janda.

Cuando el orificio de salida se reduce se observan, primero, oscilaciones en la tasa de descarga y, para agujeros aún menores, se producen obstrucciones durante las que el material deja de fluir al exterior. Estas obstrucciones pueden ser parciales [33], si el flujo se detiene momentáneamente para volver a iniciarse por sí solo, o permanentes (en la ventana de observación). Cuando el tamaño del orificio empieza a ser comparable al de los granos, la ley de Beverloo no describe correctamente el flujo, véase Fig. 1.1. El estudio de la región de flujo intermitente es limitado en la literatura. Como señalan Choi *et al.* este régimen tiende a evitarse dada la dificultad que introduce en el análisis del flujo. Sin embargo, las oscilaciones han sido observadas previamente por [34, 35].

La aparición de obstrucciones se debe a la formación de arcos a la salida del silo, ver Fig. 1.2. Si el orificio de salida es sólo moderadamente pequeño, el arco no tendrá estabilidad suficiente y será arrastrado por el material de la región superior. En este caso se observará una oscilación en el flujo. Al reducir aún más el tamaño del orificio de salida, los arcos no necesitan ser grandes y ganan estabilidad.

1.3 Medios granulares estáticos.

Los medios granulares en equilibrio mecánico están lejos de ser bien comprendidos. Como ocurre en el flujo denso, existen modelos y aproximaciones teóricas que tratan de dar cuenta de sus propiedades sin que haya emergido una imagen unificada y exitosa. En esta sección se repasan las propiedades características de los medios granulares estáticos y los modelos que se han propuesto para comprenderlas.

Distribución de fuerzas.

La distribución de fuerzas en un medio granular fue medida inicialmente por Mueth *et al.* [36]. El sistema experimental consta de un cilindro lleno de esferas de vidrio comprimido por arriba mediante un pistón. La base y las paredes del cilindro están rodeadas de papel carbón y papel blanco. Al comprimir el material del interior del cilindro, las esferas dejan marcas en el papel cuya área es proporcional a la fuerza que le comunican sus vecinos. El área de las marcas se convierte a una fuerza mediante una curva de calibración trazada previamente. Los resultados, representados en la Fig. 1.3, muestran que la distribución de fuerzas decae exponencialmente para fuerzas mayores que la media

$$P(f) \simeq e^{-\beta f}$$

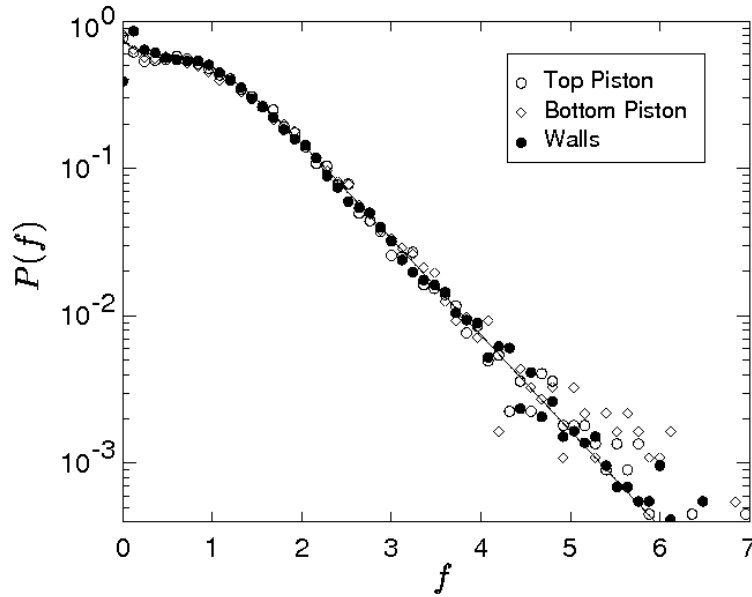


Figura 1.3: Función de distribución de las fuerzas de contacto en un cilindro comprimido por un pistón. En negro se representan los valores obtenidos en el fondo del cilindro, y en blanco los de las paredes. La línea continua es una función exponencial. Figura tomada de [36].

donde $f = F / \langle F \rangle$ es la fuerza dividida por la media y se encuentra que $\beta \simeq 1,5$. En torno a la fuerza media se encuentra que la distribución presenta una pequeña meseta e incrementa su valor para fuerzas muy pequeñas. Experimentos posteriores [37] midieron la distribución de fuerzas en un sistema similar usando diversos materiales. La $P(f)$ medida en sistemas desordenados, ordenados y con distintas rugosidades de las esferas o a distintas alturas del cilindro, fue siempre compatible con los resultados de Mueth *et al.* [36]. Los autores propusieron una expresión que ajusta la distribución de fuerzas en el rango observado, incluso las fuerzas pequeñas,

$$P(f) = a(1 - be^{-cf^2})e^{-df}$$

que es exponencial para las fuerzas grandes y da valores de d comprendidos entre 1,2 y 1,6 compatibles con los obtenidos previamente.

Los experimentos mencionados miden la distribución de fuerzas en la frontera del sistema. Sin embargo, los mismos resultados se han encontrado mediante microscopía confocal en el seno de emulsiones [38]. El uso de métodos numéricos para calcular las trayectorias individuales de los granos que componen un sistema, dado un modelo de contacto, también arroja resultados compatibles con los experimentales, véase por ejemplo [39]. En todos los casos se encuentra que la distribución de fuerzas es compatible con una caída exponencial para fuerzas mayores que la media. La forma de la distribución para fuerzas menores depende de las fuerzas externas aplicadas [40, 41]. En sistemas como silos se encuentra que la distribución tiene una pequeña meseta en torno a la fuerza media y un máximo a fuerzas menores. En sistemas en compresión isostática se ha encontrado un máximo en torno a la fuerza media y, para fuerzas menores, la distribución sólo disminuye de valor. En cada caso, estas características son universales en el sentido de que no dependen de detalles como la dureza de los granos o su rugosidad. Las distribuciones se pueden

colapsar en una sola curva cuando se representa $P(F/ < F >)$ frente a $F/ < F >$.

Esta forma de la distribución es un indicador de la alta heterogeneidad del sistema. Una descripción continua precisa una escala de longitud por encima de la cuál no haya fluctuaciones. Sin embargo, en los medios granulares estáticos las fluctuaciones pueden ser del orden de la fuerza media, lo que dificulta enormemente tal descripción continua.

Para explicar esta distribución de fuerzas se han propuesto varios modelos discretos sobre la propagación de los esfuerzos en el seno de un medio granular. El primer modelo exitoso se conoce con el nombre de *q-model* [42] en la literatura. Para simplificar, considérese un silo bidimensional con un medio granular en su interior. Se asume que el sistema puede discretizarse en una red con un cierto parámetro de red. El sistema está compuesto de sucesivas filas unas debajo de otras. La suposición fundamental de este modelo es que el peso de un grano se transmite sólo hacia abajo, a dos vecinos, recibiendo uno de ellos una fracción q de dicho peso y el otro, la restante $1 - q$. Este modelo es, por tanto, escalar e ignora la propagación de las fuerzas en dirección lateral. Cada grano tiene un peso propio (puede incluir un esfuerzo externo) y, una vez dada una distribución de los valores de q , se puede calcular el peso de todos los granos partiendo de la fila superior. Este modelo tiene la virtud de predecir una distribución de fuerzas exponencial, sin embargo presenta varios problemas. En primer lugar, la naturaleza escalar del modelo es muy sencilla e ignora, además, el momento de fuerza debido a la fricción. En el límite continuo presenta un comportamiento difusivo que no coincide con lo experimentos [42]. En una geometría de silo, con paredes en lugar de condiciones de contorno periódicas, no da lugar a la saturación de la presión descrita por Janssen [6]. Por último, el parámetro de red del modelo no se puede relacionar de manera natural con una longitud física como, por ejemplo, el tamaño de los granos.

Un modelo vectorial de la propagación de esfuerzos ha sido propuesto por Socolar [43]. Como en el modelo previo, se aproxima el medio granular por una red de modo que, en dos dimensiones, cada celda tiene dos vecinas abajo, dos arriba y una a cada lado. El modelo toma en cuenta las fuerzas normales y tangenciales así como los momentos producidos por ellas y depende de tres parámetros para los que hay que escoger una función de distribución. El modelo de Socolar da lugar a una distribución exponencial de las fuerzas y, en una geometría de silo, se obtiene una saturación de la presión como en el efecto Janssen. Además, puede identificarse de manera natural el parámetro de red con el tamaño de los granos. La aplicación de este modelo está limitada porque precisa la suposición de que todas las fuerzas tangenciales son positivas. Esto no es justificable en general y será falso, por ejemplo, en situaciones donde las deformaciones sean importantes. Una mejor comprensión de cómo las condiciones de frontera afectan a la distribución de los tres parámetros del modelo podría llevar a eliminar esta hipótesis [43].

Los modelos previos pretenden modelar el desorden de los medios granulares dando una distribución de probabilidad de los parámetros que determinan la transmisión de esfuerzos. A pesar de su éxito, un problema común que puede apuntarse es el comportamiento en el límite continuo. El *q-model* da lugar a una ecuación de difusión para los esfuerzos y el de Socolar, a una ecuación hiperbólica, mientras que la propagación de esfuerzos se describe mediante ecuaciones elípticas [44]. Un modelo de transmisión de esfuerzos que presenta este tipo de ecuación en el límite continuo es propuesto en [45]. A pesar del éxito que supone para el predecir la ecuación correcta de la propagación de esfuerzos, los modelos discretos hacen uso de visiones muy simplificadas del medio granular. Así, por ejemplo, en [45] se considera que cada grano tiene tres vecinos en la fila inferior a los que transmite dos componentes de fuerza, una vertical y otra horizontal, con fracciones dadas y se pueden proponer varias reglas para transmitir las fuerzas. En un caso sencillo se supone a uno de los vecinos alineado en la vertical con el grano considerado y a los

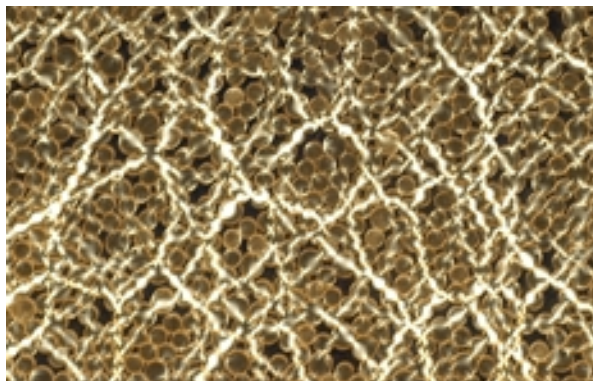


Figura 1.4: Cadenas de fuerza en un sistema de discos birrefringentes. Imagen obtenida por I. Zuriguel.

otros dos formando un ángulo dado a cada lado. Idealmente, esta aparente arbitrariedad en la elección de las disposiciones de granos y la multiplicidad de reglas para transmitir las fuerzas, no deberían presentarse en un modelo sobre el que se pueda fundamentar la comprensión de los medios granulares.

Cadenas de fuerza.

La heterogeneidad de los medios granulares estáticos que evidencia la distribución de fuerzas puede comprobarse visualmente. Para ello se iluminan discos birrefringentes colocados entre polarizadores cruzados [46]. La intensidad de luz transmitida por cada disco es proporcional a la fuerza que tiene aplicada. Las imágenes así obtenidas, véase la Fig. 1.4 muestran que, en efecto, las fuerzas no están homogéneamente distribuidas. Se aprecian zonas filamentosas muy iluminadas separadas por regiones oscuras. A esos filamentos en que los granos están sometidos a gran tensión se les ha dado en llamar cadenas de fuerza. La aparición de estas estructuras es natural: si un grano es comprimido intensamente por otros dos, al ser el sistema estático, debe aparecer una fuerza de magnitud similar en cada enlace. Esto da lugar a una cadena de dos eslabones que se extenderá al considerar al resto de granos en la vecindad. En cada enlace, la compensación de las fuerzas no es exacta debido al desorden del sistema, por lo que aparecen esfuerzos pequeños que completan el balance de fuerzas.

Las cadenas de fuerza pueden reproducirse en cálculos numéricos. Suponiendo un modelo de contacto que proporciona la fuerza presente en una colisión binaria, es posible integrar numéricamente las ecuaciones de movimiento de un conjunto de granos. Si el sistema es llevado al reposo comprimiéndolo, por ejemplo, mediante paredes móviles, las cadenas de fuerza pueden visualizarse dibujando un segmento entre los centros de granos en contacto. Si ese segmento se dibuja con una anchura proporcional a la fuerza en el contacto, se obtienen imágenes totalmente comparables a las obtenidas en experimentos con discos birrefringentes.

Se ha sugerido que estas estructuras son importantes para explicar la rigidez de un sistema granular estático. En [47] se estudia un sistema comprimido isotrópicamente en experimentos reales y mediante cálculo numérico en tres dimensiones. Cuando el sistema se torna rígido¹ se observa la aparición de cadenas de fuerzas que van de una pared a la opuesta, paralelas a la dirección en que se aplica la compresión (en el cálculo numérico se emplearon condiciones periódicas en las dos direcciones perpendiculares).

¹Este instante puede identificarse por el comportamiento de la distribución de fuerzas, como se explica más adelante.

El uso de las cadenas de fuerzas en general y, para problemas de rigidez en particular, queda limitado por dos inconvenientes. El primero, y más grave, es la ausencia de consenso en la definición del concepto “cadena de fuerza”. En [48] se revisan las diferentes definiciones que se han propuesto en la literatura sin que una haya emergido como la más apropiada; de modo que el trabajo cuantitativo de distintos autores no puede compararse entre sí. En cuanto a la rigidez, una o varias cadenas extendidas entre las fronteras del medio no pueden explicar su rigidez, puesto que al estar compuestas de discos (o esferas) son intrínsecamente inestables debido a la rotación de sus constituyentes. La rugosidad de los granos en los experimentos no es suficiente para trabarlos entre sí, por lo que la frustración de las rotaciones debe ser debida a los granos vecinos. Por tanto, es necesario considerar más estructuras que las simplemente lineales. Un análisis de la frustración de rotaciones y su papel en la rigidez lo ha llevado a cabo N. Rivier [49]. El autor encuentra que la estabilidad de un medio granular es debida a la frustración de las rotaciones en circuitos de contactos entre un número impar de granos. Si sólo hay circuitos pares, al no frustrarse las rotaciones, se tiene un material que no puede resistir ningún esfuerzo de corte.

Isostaticidad.

El papel de los circuitos en un medio granular ha sido considerado de una forma diferente por Ball y Blumenfeld [50]. Los autores consideran un medio granular en un escenario intermedio entre sólido y líquido, lo que denominan estado marginal. Este estado se caracteriza mediante el número de coordinación Z , el número medio de contactos por grano. Si se considera un sistema de N granos con número de coordinación Z , en ausencia de fricción hay $ZN/2$ fuerzas de contacto y Nd ecuaciones de balance, donde d es la dimensión espacial. Por tanto, sólo cuando $Z = 2d$ el problema de encontrar las fuerzas sobre cada grano está bien definido y el sistema se denomina isostático [51]. Si Z es menor que $2d$ el sistema sufrirá un reordenamiento, pues no es estable. Si, por el contrario, Z es mayor que $2d$ hay más fuerzas de contacto que ecuaciones de balance y el sistema se denomina hiperestático. Tomando en cuenta la fricción [51] se tiene que el número de componentes de las fuerzas de contacto es $ZdN/2$ y hay dN más $d(d-1)N/2$ ecuaciones de balance de fuerza y momento, respectivamente. El sistema es isostático cuando $Z = d + 1$.

En [50] se considera un medio granular isostático, bidimensional y con fricción. Para poder resolver las ecuaciones de balance macroscópicas, de fuerza y momento,

$$\vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma} = \vec{F}, \quad \mathcal{A}(\hat{\sigma}) = 0 \quad (1.21)$$

donde \vec{F} es un campo de fuerza externo, $\hat{\sigma}$ el tensor de esfuerzos y $\mathcal{A}(\hat{\sigma}) = \frac{1}{2}(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^T)$ su parte antisimétrica, se necesitan $d(d-1)/2$ ecuaciones constitutivas que ligan la geometría local con el tensor de esfuerzos. Este problema es resuelto considerando circuitos alrededor de cada hueco en el sistema. En torno a cada hueco se establece un circuito de granos en sentido antihorario, y a cada uno de éstos circuitos le corresponde un circuito de fuerzas. De esta manera, la fuerza resultante en cada contacto es la diferencia entre dos circuitos de fuerza. Estas fuerzas tienen la ventaja de que el tensor de esfuerzos sobre cada grano es expresable directamente a través de ellas. La relación constitutiva que obtienen los autores es

$$Tr(\hat{Q} \cdot \hat{\sigma}) = 0 \quad (1.22)$$

donde $\hat{Q} = \hat{R} \cdot \hat{P} \cdot \hat{R}^T$, siendo \hat{R} una rotación de $\frac{\pi}{2}$ y \hat{P} un tensor que expresa la fluctuación en la desviación de la geometría local de la isotropía. Para una aproximación más visual, los autores

proponen considerar tensores \hat{P}_+ y \hat{P}_- locales tales que $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = 0$ y etiquetar a cada grano con un $+$ o un $-$. Si el sistema está ordenado, entonces, todas las sumas y promedios serán cero. En cambio, si hay desorden, que puede manifestarse en un circuito impar en el que habría un tensor de más (\hat{P}_+ , por ejemplo), se puede identificar

$$\hat{Q} = \hat{R} \cdot \hat{P}_+ \cdot \hat{R}^T. \quad (1.23)$$

De este modo se puede establecer una analogía con la aproximación de Rivier [49]. Modelos continuos para la distribución de esfuerzos similares al de Ball y Blumenfeld pueden encontrarse en [52, 53].

Mecánica estadística.

El reto que supone incluir la elevada heterogeneidad de la distribución de fuerzas o la hiperestaticidad en un modelo continuo, así como las limitaciones de los modelos discretos, han motivado que aparezcan otras aproximaciones al problema de la distribución de fuerzas. Una analogía con la mecánica estadística fue propuesta por S. Edwards [54] y ha sido desarrollada posteriormente por numerosos autores [55–58]. La propuesta de Edwards se aplica a los medios granulares que se hallan en un estado que se designa mediante la palabra inglesa *jamming* [59]. Este término designa el estado de un sistema cuya evolución queda bloqueada en un mínimo local de energía correspondiente a una configuración lejos del equilibrio. Los sistemas térmicos siempre pueden explorar el espacio de fases en busca de mínimos de energía. Incluso si la temperatura desciende, las vibraciones térmicas intrínsecas les permiten saltar de un mínimo a otro, lentamente, en un proceso conocido como envejecimiento. Los medios granulares, debido a la naturaleza disipativa de sus interacciones, pierden rápidamente la energía de que disponen a menos que se les suministre desde el exterior. Esto los convierte, como se ha mencionado antes, en sistemas atérmicos incapaces de explorar el espacio de fases, ni siquiera mediante vibraciones intrínsecas, que quedan, por tanto, atascados en configuraciones fuera del equilibrio.

La idea de Edwards es que todos los estados atascados son equiprobables y accesibles unos a otros mediante una perturbación externa como un batido o la aplicación de un esfuerzo de corte. El hecho de que todos los estados atascados deban ser accesibles unos a otros es una hipótesis ergódica que introduce una importante distinción entre sistemas en equilibrio mecánico y sistemas atascados. Considérese una pila formada dejando caer granos sobre una superficie horizontal. Se forma un depósito de forma cónica con cierto ángulo de reposo. Una perturbación externa provocará una avalancha de granos y se alcanzará un nuevo estado de reposo. El primer estado no es un estado atascado puesto que no puede alcanzarse desde el segundo, lo que viola la hipótesis ergódica asumida por Edwards. Este ejemplo ilustra que los estados atascados deben haber sido liberados del efecto memoria de los medios granulares mediante algún proceso de preparación.

Un ejemplo bien conocido de tal proceso es el batido [60]. Esquemáticamente, el experimento consiste en llenar un depósito con un medio granular que quedará con una fracción de compactación de, aproximadamente, 0,6. A continuación el sistema es sometido a una serie de batidos verticales de frecuencia y amplitud fijas. Con el término batido se hace referencia a que al sistema se le permite relajar completamente entre dos agitaciones sucesivas. Se observa que la densidad del sistema aumenta lentamente con el número de batidos hasta alcanzar una saturación. En este punto se incrementa la intensidad del batido, habitualmente, incrementando la amplitud del mismo y se vuelve a esperar a que el sistema alcance una densidad constante. De esta forma se puede ir trazando la curva de densidad (estacionaria) frente a intensidad de batido $\Gamma = A\omega^2/g$ siendo ω

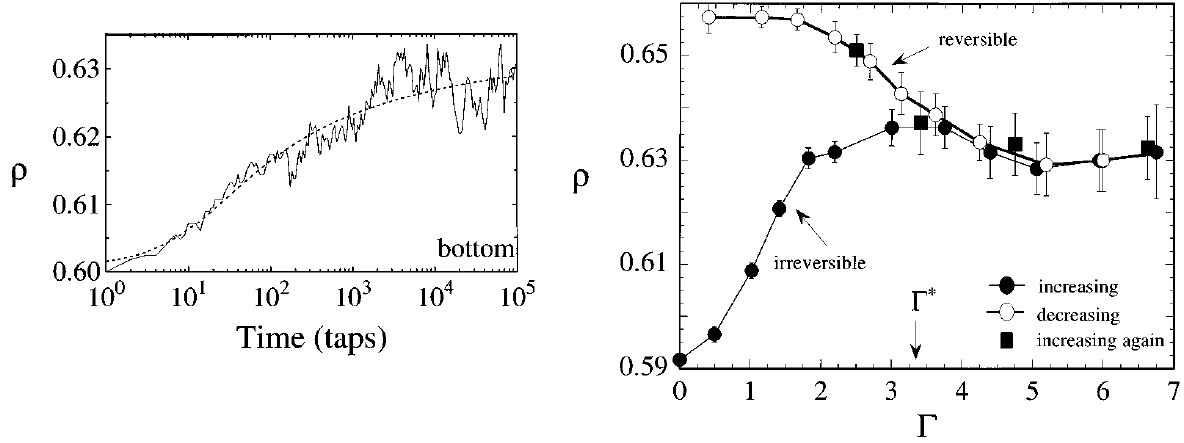


Figura 1.5: Izquierda: La densidad de un depósito granular aumenta lentamente con el número de batidos hasta que se alcanza un valor estacionario. Derecha: La fracción de compactación (estacionaria) en función de la intensidad de batido en un empaquetamiento granular. Los círculos negros son los datos obtenidos al aumentar Γ desde la densidad inicial de llenado. Los círculos blancos, los datos obtenidos al disminuir la intensidad de batido, y los cuadrados negros, los que se obtienen al volverla a disminuir. Los círculos blancos y cuadrados negros definen la rama reversible. Figuras tomadas de [60].

la frecuencia, A la amplitud y g la gravedad. La curva Fig. 1.5 empieza con una densidad en torno a 0,6 a $\Gamma = 0$ que aumenta con la intensidad de batido. Presenta un máximo poco después de $\Gamma = 3$ y un mínimo en torno a $\Gamma = 5$. Si a una Γ alta se invierte el proceso y se va disminuyendo la intensidad de batido, los puntos van por la misma curva hasta el máximo en torno a $\Gamma = 3$. En este punto, al disminuir la intensidad de batido, la densidad aumenta alcanzando un máximo ligeramente por encima de 0,65 cerca de $\Gamma = 0$. Revirtiendo de nuevo el proceso, los nuevos puntos van sobre la última curva trazada. Esta constituye, por tanto, el lugar geométrico de los estados que se pueden alcanzar unos desde los otros y se denomina rama reversible. Los estados sobre la rama reversible son estados atascados.

En mecánica estadística clásica todos los microestados que dan lugar al mismo macroestado de equilibrio se toman como equiprobables. La función de distribución del sistema se determina a partir del hamiltoniano del mismo. En el caso de los medios granulares se considera que, en lugar de la energía, es el volumen la cantidad relevante que determina su comportamiento. El hamiltoniano es reemplazado por una función \mathcal{W} que representa el volumen ocupado por el sistema en función de los grados de libertad del mismo. Una posible definición es tomar la suma de los volúmenes de Voronoi del sistema, otras definiciones usadas son las dadas en [50, 61]. Una vez adoptada una definición de la función de volumen es posible calcular la entropía S del sistema del mismo modo que se hace en mecánica estadística, proporcional al número de microestados, que se obtiene integrando la función de volumen en el espacio de fases de los estados atascados. El análogo de la temperatura se denomina compactividad X_V y se define mediante $X_V^{-1} = \partial S / \partial V$. Un valor alto de la compactividad implica que el sistema es poco denso, mientras que sistemas con alta densidad tienen una compactividad baja.

La función de distribución en este formalismo puede calcularse usando argumentos análogos a los de mecánica estadística [59] obteniéndose

$$f_\alpha = \frac{e^{-\mathcal{W}^\alpha / \lambda X}}{Z} \quad (1.24)$$

$$(1.25)$$

$$Z = \sum_\alpha e^{-\mathcal{W}^\alpha / \lambda X} \Theta_\alpha \quad (1.26)$$

donde Θ es la función escalón y λ una constante análoga a la constante de Boltzmann. El índice α va desde 0 para el grano en el que está centrado cada volumen (las celdas de Voronoi, por ejemplo) y de 1 a 4 para los vecinos, en un sistema isostático en dos dimensiones. Utilizando técnicas de microscopía confocal se ha medido la distribución de volúmenes en una emulsión en tres dimensiones, obteniéndose resultados compatibles con la expresión anterior [59].

Estado atascado y estructura interna.

En la literatura de medios granulares se define un medio granular atascado como aquél que desarrolla una resistencia no nula a los esfuerzos de corte. La transición desde un estado diluido a un estado atascado ha sido estudiada recientemente tanto experimental [62], como teórica [63] y numéricamente [40, 41]. La transición al estado atascado puede detectarse analizando el comportamiento de la función de distribución de las fuerzas de contacto [40]. En el estado diluido la distribución tiene un máximo en las fuerzas pequeñas y decrece monótonamente a fuerzas mayores. Cuando el sistema se aproxima a la transición empieza a desarrollarse una meseta en torno a la fuerza media. En el estado atascado la función de distribución presenta un máximo cerca de la fuerza media y decae de forma aproximadamente exponencial a fuerzas mayores. La forma de la distribución para las fuerzas menores es difícil de establecer experimentalmente debido a la limitada resolución de los experimentos.

La teoría de Henkes y Chakraborty [63], aplicable a granos sin fricción, presenta la transición al estado atascado como un fenómeno crítico. Predice una ley de potencias para la presión y el número de coordinación que está en buen acuerdo con los resultados experimentales [62]. El experimento realizado consiste en la compresión isotrópica desde un estado diluido y posterior descompresión, hasta alcanzar de nuevo un estado diluido, de un sistema bidimensional de discos birrefringentes. El sistema está en posición horizontal para eliminar la fuerza de la gravedad. Durante el protocolo, cada paso de compresión o descompresión está seguido de un proceso de batido que permite relajar los esfuerzos en el sistema. La aproximación al estado atascado se mide mediante la variable $\phi - \phi_c$, es decir, el exceso de fracción de compactación respecto de la correspondiente al estado crítico ϕ_c . La fracción de compactación crítica fue estimada a partir del punto en el que la presión comienza a incrementarse, obteniendo un valor en torno a $\phi_c \simeq 0,84$. Los exponentes para el número de coordinación y la presión se estimaron en 0,56 y 1,1 respectivamente. Estos resultados dan un buen acuerdo con el modelo teórico y estudios numéricos [41, 64, 65].

Una alternativa a la distribución de fuerzas para señalar la transición al estado atascado es la densidad de estados vibratoriales $D(\omega)$ [51, 66]. Se encuentra que esta función se desvía del comportamiento de Debye $D(\omega) \propto \omega^{d-1}$ previsto para un sólido y presenta, en cambio, una meseta que se extiende hasta $\omega = 0$ en el punto crítico. Cuando este se rebasa, incrementando la densidad, aparece una frecuencia de corte por debajo de la cuál se recupera el comportamiento $D(\omega) \propto \omega^{d-1}$. La densidad de estados vibratoriales se determina mediante la matriz dinámica del sistema [67]. Considérese un conjunto de N partículas conectadas mediante resortes, la energía del sistema está dada por

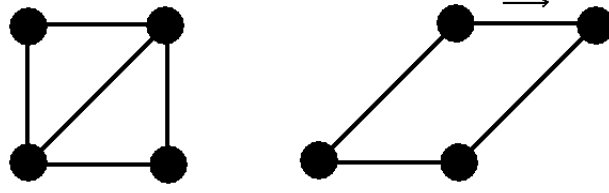


Figura 1.6: Izquierda: un conjunto de puntos que se comportan como bisagras perfectas unidas mediante barras rígidas; en dos dimensiones, no se puede efectuar ningún movimiento y el sistema completo es rígido. Derecha: un *modo blando* (*soft-mode*) aparece al eliminar una de las barras. Para realizar este movimiento no es necesario vencer ninguna fuerza restauradora.

$$\delta E = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [(\delta \vec{R}_j - \delta \vec{R}_i) \cdot \vec{n}_{ij}]^2 \quad (1.27)$$

donde la suma se toma entre las partículas en contacto, \vec{n}_{ij} es el vector unitario que va de i a j y $\delta \vec{R}_i$ es el desplazamiento de la partícula i . En notación matricial, la expresión anterior toma la forma

$$\delta E = \langle \delta \mathbf{R} | \mathcal{M} | \delta \mathbf{R} \rangle \quad (1.28)$$

donde $|\delta \mathbf{R}\rangle$ es el vector de los desplazamientos con componentes $\delta \vec{R}_1 \dots \delta \vec{R}_N$ y \mathcal{M} es la matriz dinámica. Los autovectores de la matriz dinámica son los modos normales del sistema, y los correspondientes autovalores son proporcionales al cuadrado de las frecuencias. Para que uno de los modos tenga energía nula se debe cumplir

$$(\delta \vec{R}_j - \delta \vec{R}_i) \cdot \vec{n}_{ij} = 0 \quad (1.29)$$

para todos los contactos $\langle ij \rangle$. La ecuación precedente describe desplazamientos en los que se conservan las distancias, a primer orden. Por lo tanto, si un sistema presenta modos con energía nula, entonces, existen desplazamientos, en los que los constituyentes conservan sus distancias (como si estuvieran conectados por barras rígidas), que no precisan vencer la fuerza de restauración en los contactos, que se comportan como bisagras. A estos modos se les denomina *blandos*, *soft-modes* en la literatura en inglés. La Fig. 1.6 muestra un ejemplo esquemático. Si un sistema no presenta modos de energía nula, ninguno de estos desplazamientos es posible y el sistema es rígido. La densidad de estados vibracionales permite, por tanto, contemplar la transición al estado atascado como una transición por rigidez.

La transición al estado atascado en un sistema tridimensional es analizada experimental y numéricamente en [47]. Los experimentos, análogos a los de Mueth *et al.*, consisten en la compresión de un cilindro lleno de esferas de vidrio mediante un pistón. Las fuerzas se miden mediante la técnica del papel carbón. El método numérico utiliza condiciones de contorno periódicas, y comienza comprimiendo y descomprimiendo un conjunto de granos hasta dejarlo a una densidad por debajo de un valor crítico y con un número de coordinación medio igual a cero. A continuación el sistema es comprimido a lo largo de uno de los ejes hasta que se alcanza una presión prefijada. La presión y el número de coordinación en función de $\phi - \phi_c$ dan lugar a leyes de potencias con exponentes 1,26 y 0,29 respectivamente en un sistema compuesto de granos con fricción. La fracción de compactación crítica es estimada en $\phi_c = 0,6284$. Si se elimina la fricción entre los

granos los autores encuentran que la presión y el número de coordinación aún siguen leyes de potencias respecto a $\phi - \phi_c$ pero con exponentes 2,0 y 0,94, respectivamente, y con $\phi_c = 0,634$.

En otro enfoque, la estructura interna de un empaquetamiento granular ha sido analizada recientemente tanto experimental [68, 69] como numéricamente [70]. En [68] los datos de seis muestras de esferas acrílicas monodispersas, con fracciones de compactación en el rango 0,586 – 0,64, son analizados mediante tomografía axial de rayos X. Se encuentra que el medio granular puede ser descrito mediante un conjunto de tetraedros que llenan el volumen del sistema. Esto se implementa mediante la descomposición de Delaunay del conjunto de puntos que definen los centros de las esferas. Apelando a la imagen de Edwards de los medios granulares, el autor supone que cada tetraedro es una celda que intercambia volumen con las vecinas. La función de distribución de los volúmenes puede obtenerse suponiendo *i*) que cada conjunto posible de celdas da lugar a un empaquetamiento mecánicamente estable; *ii*) que las esferas no se solapan, lo que implica que el mínimo volumen de un tetraedro es $\sqrt{2}/12d^3$; y *iii*) que la suma de los volúmenes de todas las celdas es igual al volumen del sistema. El resultado es

$$P(v) = \frac{1}{\langle v \rangle - v_{min}} \exp\left(-\frac{v - v_{min}}{\langle v \rangle - v_{min}}\right) \quad (1.30)$$

donde v_{min} es el volumen mínimo de un tetraedro regular y $\langle v \rangle$ el volumen medio. De los datos experimentales se encuentra que, en efecto, $P(v) \propto \exp(-\beta v)$ para volúmenes grandes. El parámetro β es el análogo a la compactividad de Edwards y adquiere diferentes valores en función de la fracción de compactación. Su valor se puede calcular analíticamente y los resultados están en muy buen acuerdo con los experimentales.

En [69] se demuestra que las distribuciones de volúmenes de Delaunay de diversos sistemas de esferas colapsan al representarlos en función de $(v - v_{min})/(\langle v \rangle - v_{min})$. Un colapso análogo se obtiene para la distribución de volúmenes de Voronoi del sistema, como puede verse en la Fig. 1.7. En ambos casos la curva en la que se produce el colapso está muy bien descrita por la exponencial

$$P(v) = \frac{k^k}{(k-1)!} \frac{(v - v_{min})^{(k-1)}}{(\langle v \rangle - v_{min})^k} \exp\left(-k \frac{v - v_{min}}{\langle v \rangle - v_{min}}\right) \quad (1.31)$$

con $k = 1$ para los volúmenes de Delaunay y $k = 12$ para los de Voronoi.

Estos análisis muestran, en definitiva, que un medio granular puede ser descrito mediante un conjunto de tetraedros que llenan el espacio y cuyos volúmenes están distribuidos según una exponencial, para volúmenes grandes. Esta última observación es compatible con la imagen de Edwards de los medios granulares, en la que una analogía con la mecánica estadística clásica predice una distribución exponencial los volúmenes accesibles a los elementos en que se pueda considerar subdividido el sistema.

En [70] se ahonda en el análisis de la estructura tetraédrica de depósitos granulares tridimensionales. Mediante métodos numéricos se generan empaquetamientos de esferas idénticas con fracciones de compactación entre 0,53 y 0,71. Los sistemas resultantes se analizan mediante particionamiento de Delaunay, evaluándose la forma de los tetraedros a través de un parámetro δ . Este parámetro se define como $\delta = e_{max} - 1$, siendo e_{max} la máxima longitud encontrada en un tetraedro. Así, si $\delta = 0$ el tetraedro es regular, todas las esferas que lo componen están en contacto. Al fijar un valor de δ se admiten como tetraedros todos los *simples* de Delaunay con un valor menor que dicho umbral.

Los autores encuentran que el volumen ocupado por los tetraedros aumenta con la fracción de compactación del sistema, ver Fig. 1.8. La fracción de volumen ocupada por los tetraedros alcanza el 30%, el mismo nivel que en estructuras cristalinas. Además, las curvas presentan un cambio de

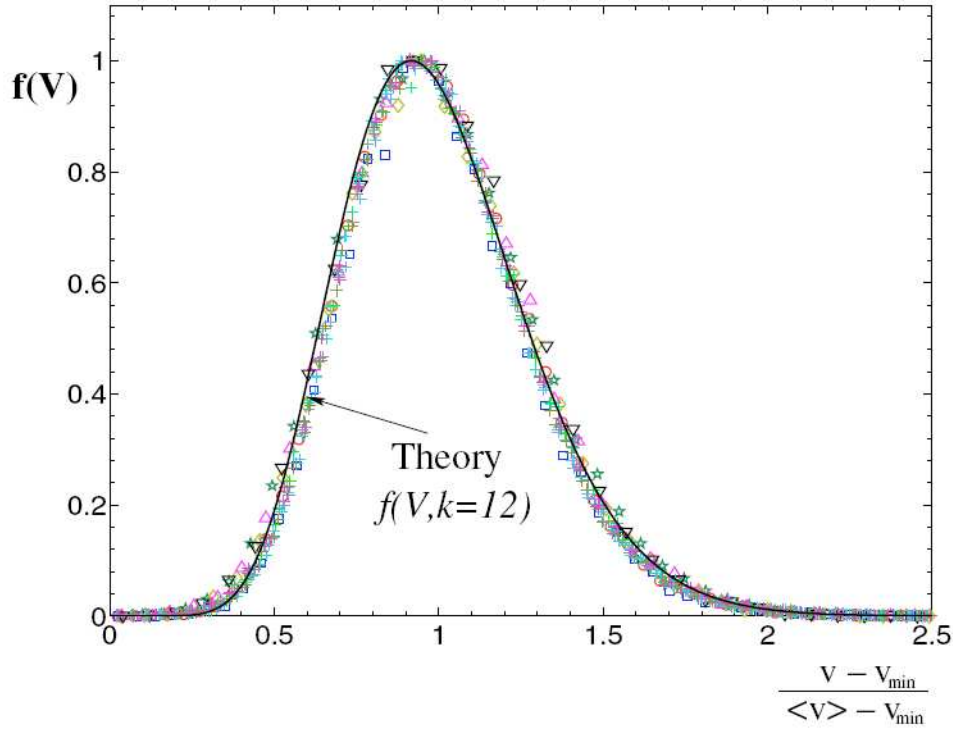


Figura 1.7: Función de distribución de volúmenes de Voronoi obtenidos en [69]. Las distribuciones correspondientes a muestras con distinto número de esferas y distinta fracción de compactación colapsan al representarlas en función de $\frac{v-v_{min}}{\langle v \rangle - v_{min}}$. Figura tomadas de [69].

tendencia en $\phi \simeq 0,64$, un máximo para $\delta = 0,255$. Estos resultados son indicativos de que, a dicha fracción de compactación, un depósito granular presenta un grado de orden relativamente elevado, con los tetraedros ocupando casi tanto volumen como el que ocupan en estructuras cristalinas.

A continuación los autores analizan los agregados compuestos por varios tetraedros unidos por sus caras. Cuando se representa la fracción de volumen ocupada por estos agregados frente a la fracción de compactación, Fig. 1.8 se encuentra un máximo en 0,646 independientemente del valor de δ . La curva asciende con ϕ debido a que cada vez hay más tetraedros que tienden, además, a agruparse. El brusco descenso posterior se debe a que aparecen regiones cristalinas en las que los tetraedros se unen a través de sus aristas. El comportamiento de la curva de la fracción de volumen ocupada por los agregados de tetraedros es indicativo, según los autores, de la naturaleza crítica de la transición estructural en torno a $\phi = 0,646$.

De los estudios anteriores se desprende que los medios granulares pueden ser analizados en términos de estructuras mínimas. Los resultados obtenidos mediante este enfoque pueden relacionarse con los obtenidos por otros métodos. Así, por ejemplo, puede constatar que la transición por rigidez en torno a $\phi = 0,64$ [47] coincide con la transición estructural descrita arriba.

La red de contactos.

Un medio granular puede representarse esquemáticamente considerando un punto en el centro de cada grano y trazando una línea entre puntos si los granos correspondientes están en contacto. El conjunto de nodos y aristas así obtenidos es un grafo cuya estructura topológica se puede analizar. En el presente trabajo se denominará *red de contactos* al grafo obtenido al considerar todos los granos que están en contacto con, al menos, otro grano y las aristas que representan dichos

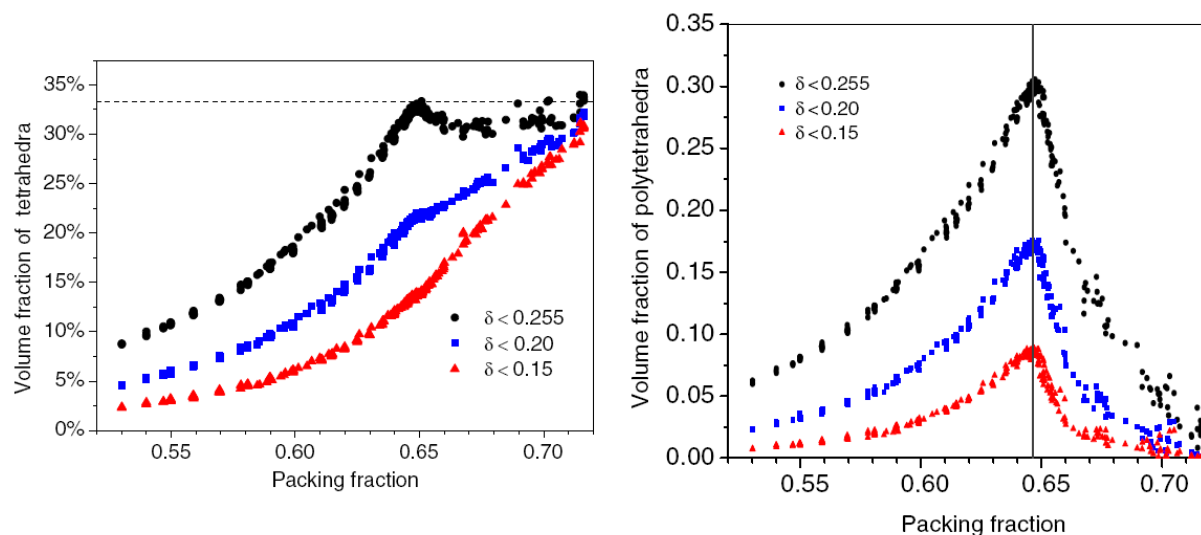


Figura 1.8: Fracción de volumen en tetraedros (izquierda) y politetraedros (derecha) en función de la fracción de compactación del sistema y del factor de calidad δ de los tetraedros. La línea de puntos en la gráfica de la izquierda indica la cota de 33% que es el volumen que ocupan los tetraedros en estructuras cristalinas hcp y fcc. En la gráfica de la derecha, la línea vertical está en $\phi = 0,646$. Figuras tomadas de [70].

contactos. Esta representación permite continuar el estudio estructural de los medios granulares con nuevas herramientas.

El estudio mediante técnicas estadísticas y numéricas de los grafos se encuentra comprendido dentro del campo conocido como redes complejas. Las redes (o grafos) permiten representar de forma abstracta una gran diversidad de sistemas, desde redes sociales hasta redes de proteínas pasando por redes de ordenadores o páginas web. Las propiedades topológicas de estas redes permiten analizar cómo se propaga la información en las mismas, lo que posibilita formular tanto modelos de formación de opinión como de propagación de enfermedades. La vulnerabilidad de una red de ordenadores o la planificación urbanística, son problemas que pueden representarse y estudiarse con las herramientas abstractas de las redes complejas. Trabajos de revisión recientes que contienen gran parte de las definiciones, contribuciones y bibliografía importantes pueden encontrarse en [71–73]. A continuación se dan las definiciones más relevantes.

El *grado de un nodo o vértice*, también denominado *conectividad* k es el número de aristas conectadas a dicho nodo. El conjunto de aristas conectadas a un nodo puede, en general, dividirse entre *salientes* y *entrantes* y se dice que la red es *dirigida*. Un ejemplo es la *WWW*, la red páginas web, donde los enlaces presentes en un página llevan fuera de ella, mientras que hacia a ella llevan los que están en otras páginas. En este trabajo se considerarán redes no dirigidas. Tampoco se considerarán *redes con peso* en las que cada vértice tiene asociado un *peso* ω que mide su importancia relativa. La *matriz de adyacencia* A de una red no dirigida y sin peso se define como

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i \neq j \text{ y los vértices } i \text{ y } j \text{ están conectados} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

La conectividad de la red o conectividad media se define como

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \frac{1}{N} \sum_{ij} a_{ij} \quad (1.32)$$

donde la suma recorre todos los vértices de la red.

El coeficiente de *clustering* o *transitividad* mide la densidad de triángulos (circuito cerrado de tres aristas) en una red. Este coeficiente se define mediante la relación

$$C = \frac{3 \times \text{número de triángulos en la red}}{\text{número de tríos de vértices}}. \quad (1.33)$$

Se denomina *trío* al conjunto formado por un vértice al que están conectadas dos aristas. La transitividad toma valores $0 \leq C \leq 1$. Watts y Strogatz [74] propusieron una versión local de este coeficiente

$$C_i = \frac{\text{número de triángulos conectados con el vértice } i}{\text{número de tríos centrados en } i}. \quad (1.34)$$

Si el vértice tiene grado 0 ó 1 el denominador es nulo, entonces se toma $C_i = 0$. El coeficiente correspondiente a toda la red es

$$C = \frac{1}{N} \sum_i C_i. \quad (1.35)$$

Esta segunda definición es más fácil de implementar numéricamente que la primera y es ampliamente usada en la literatura.

Una medida habitual en redes es la distancia geodésica (más corta) media l

$$l = \frac{1}{n(n+1)/2} \sum_{i>j} d_{ij} \quad (1.36)$$

donde d_{ij} es la distancia más corta entre los nodos i y j . Al calcular l se puede determinar, además, el diámetro de la red: la mayor de las distancias geodésicas d_{ij} .

Existen dos propiedades que han emergido como características comunes de muchas redes reales: el efecto *mundo-pequeño* (*small-world* en la literatura en inglés) y una ley de potencias para la distribución de conectividades. El efecto *small-world* hace referencia al hecho de que los nodos de una red suelen encontrarse a una distancia (medida en número de aristas) muy corta. Así, muchas redes sociales tienen distancias medias en torno a 6 o menos, y la red *WWW Altavista*, con unos 200 millones de nodos, presenta un valor $l \simeq 16$ [72]. Cuantitativamente, se dice que una red presenta efecto *small-world* cuando l no crece más rápido que el logaritmo del número de nodos de la red.

Las redes cuya distribución de conectividades sigue una ley de potencias $P(k) \propto k^{-\alpha}$ se denominan *libres de escala* (*scale-free*). De nuevo, esta propiedad la comparten muchas redes del mundo real como la *WWW*, citas científicas², internet (al nivel de routers) o redes metabólicas. En la mayoría de casos el valor del exponente α está entre 2 y 3.

A continuación se describen brevemente algunos de los modelos de red más relevantes aparecidos en la literatura.

Modelo de Erdős-Rényi. Este modelo, también denominado grafo aleatorio, fue propuesto por primera vez por Rapoport [75] pero analizado exhaustiva y rigurosamente por Erdős y Rényi [76]. El modelo se define tomando n nodos y conectando cada par con probabilidad p . Cuando se toma el límite de n grandes con el grado medio $z = p(n-1)$ fijo, y teniendo en cuenta que la presencia

²Datos del Institute for Scientific Information [72] de 1981 – 1997.

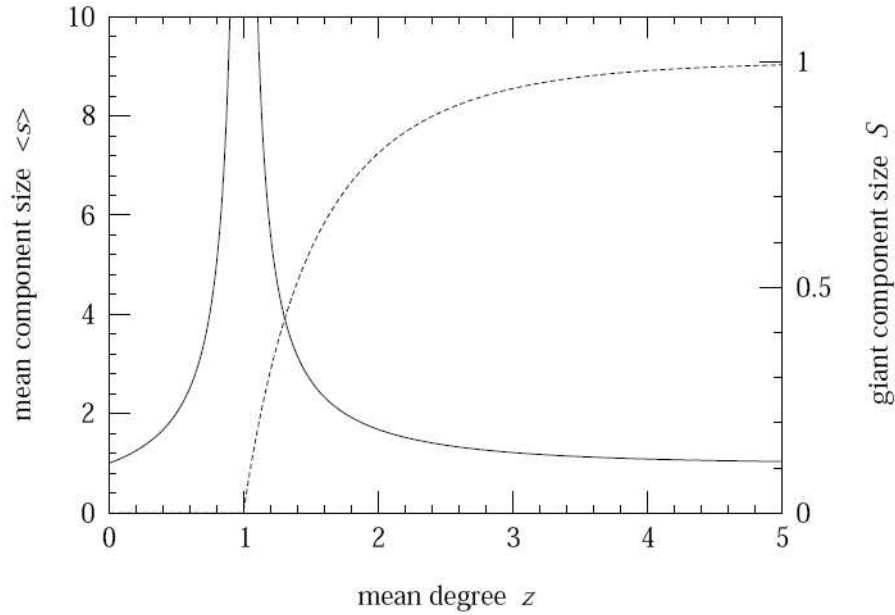


Figura 1.9: El tamaño medio de los componentes del grafo $\langle s \rangle$ y el tamaño del componente gigante S en función del número medio de contactos Z , para un grafo de Erdős-Rényi. La gráfica se puede interpretar como mostrando una transición de fase en $Z = 1$, entonces S se interpreta como un parámetro de orden y $\langle s \rangle$ como sus fluctuaciones. Figura tomada de [72].

o ausencia de una arista no afecta a las demás, la probabilidad de que un vértice tenga grado k está dada por una distribución de Poisson

$$p_k = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \simeq \frac{z^k e^{-z}}{k!}. \quad (1.37)$$

El modelo de Erdős-Rényi exhibe una transición de fase desde un estado de baja densidad (a p bajo) en el que hay muy pocas aristas y todos los componentes son pequeños, con sus tamaños distribuidos según una exponencial, a un estado de alta densidad (a p alto) en el que una gran parte de los componentes están unidos en un sólo *componente gigante*, con sólo unos pocos nodos repartidos en pequeños componentes con distribución de tamaños exponencial. Esta transición ocurre en $Z = 1$, puesto que para valores menores el tamaño del componente gigante es negativo. En torno a $Z = 1$ el tamaño medio de los componentes $\langle s \rangle$ diverge, mientras que el tamaño S del componente gigante crece primero y luego se satura, ver Fig. 1.9. Así, S se puede interpretar como un parámetro de orden y $\langle s \rangle$ como sus fluctuaciones.

El modelo aleatorio exhibe la propiedad de *small-world*. En efecto, el número medio de vecinos a distancia l de un vértice dado es Z^l , por lo que para abarcar la red entera d debe ser tan grande como el tamaño de la red $Z^d \simeq n$, y, por tanto, $l \simeq \log n / \log Z$. Sin embargo, el grafo aleatorio se diferencia en muchos aspectos de las redes reales. Claramente, la distribución de conectividades no es una ley de potencias; y la transitividad va como n^{-1} , mientras que es alta en las redes sociales. Modelos generalizados del grafo aleatorio con propiedades más semejantes a las de redes reales son posibles, véase [72], sin embargo, modelos diferentes han tenido más éxito en este aspecto.

Modelo de Watts-Strogatz. Watts y Strogatz construyeron su modelo [74] para que tuviera una alta transitividad, por lo que también se conoce como *modelo de mundo pequeño* (*small world*

model). El caso más estudiado es el unidimensional, en el que se parte de una red de L vértices con condiciones de contorno periódicas (un anillo) y cada vértice se une a los vecinos que están dentro de una distancia k , medida en sitios de la red, con lo que se forman Lk aristas. A continuación se lleva a cabo un proceso de *reenlazado*. Para ello se examina cada arista y, con probabilidad p , se mueve uno de sus extremos a una nueva posición elegida al azar (uniformemente) de entre todos los sitios de la red. En el modelo original no se permitían las aristas dobles ni los autoenlaces. Si se toma $p = 0$ se obtiene una red regular, mientras que con $p = 1$ el resultado es muy similar a un grafo aleatorio. Watts y Strogatz mostraron, mediante cálculo numérico, que existe una región intermedia en la que el modelo presenta una alta transitividad y distancias medias cortas. La transitividad fue calculada exactamente por Barrat y Weigt [77]; la distancia geodésica media l , en cambio, sólo puede calcularse aproximadamente [78].

El modelo de Watts y Strogatz no presenta una ley de potencias para la distribución de conectividades, lo que limita su aplicación a las redes reales. Sin embargo, el modelo se aplica a problemas de percolación, osciladores acoplados, juegos iterativos, procesos difusivos o modelos de espín [72].

Modelo de Barabási-Albert. Este es un modelo de crecimiento de redes [71]. Se parte de un conjunto de nodos n_0 y se van añadiendo nuevos nodos con m vértices, $m \leq n_0$. Cada vértice del nuevo nodo se enlaza a uno de los nodos ya presentes en el sistema. La probabilidad Π de que un nuevo nodo se conecte a un nodo i depende de la conectividad de este último

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}. \quad (1.38)$$

Este mecanismo de crecimiento de la red recibe el nombre de *enlazamiento preferente* (*preferential attachment*). En el modelo original m es una constante y el comportamiento para tamaños de grafo grandes puede resolverse exactamente [79, 80]. En estas condiciones se obtiene una distribución de conectividades $p_k \sim k^{-3}$. El modelo de Barabási-Albert puede explicar, por tanto, las leyes de potencias que exhiben muchas redes reales. Además, el exponente predicho en el modelo original es muy similar al observado.

El modelo puede generalizarse considerando que la conectividad de los nuevos nodos m varía con el tiempo o funciones no lineales para la probabilidad de enlazamiento $\Pi(k_i)$. De esta manera se obtienen distribuciones $p_k \sim k^{-\gamma}$ en las que el exponente depende de los nuevos parámetros del modelo y puede, por tanto, explicar mejor la variabilidad de exponentes observada entre las redes reales.

En [81] se expone un modelo denominado *red de Apolonio* por estar definida a partir de un empaquetamiento de Apolonio. Este empaquetamiento comienza con tres esferas iguales que están en contacto unas con otras. El hueco que queda se llena con una esfera que está en contacto con las tres primeras. El proceso se repite para llenar los huecos recién creados y los que se van generando en cada iteración. El empaquetamiento así generado tiene la propiedad de llenar el espacio cuando se lleva al límite. En [81] se construye una red situando un nodo en el centro de cada disco de un empaquetamiento de Apolonio bidimensional, y trazando una arista entre los discos en contacto. Esta red tiene la propiedad de ser *small world* y libre de escala. Además, rellena el espacio, se puede embeber en una geometría euclídea y sus aristas nunca se cruzan (*matching graph* en inglés). Los autores sugieren que una red así podría utilizarse para describir empaquetamientos granulares, pero no hacen una aplicación de este caso concreto. Previamente P. M. Adler [82] utilizó una red similar para estudiar el transporte en medios porosos.

Si bien en la literatura granular es habitual encontrar los términos *red de contactos* o *red de fuerzas*, no hay apenas estudios topológicos de dichas redes. En 1980 J. A. Dodds [83] estudió

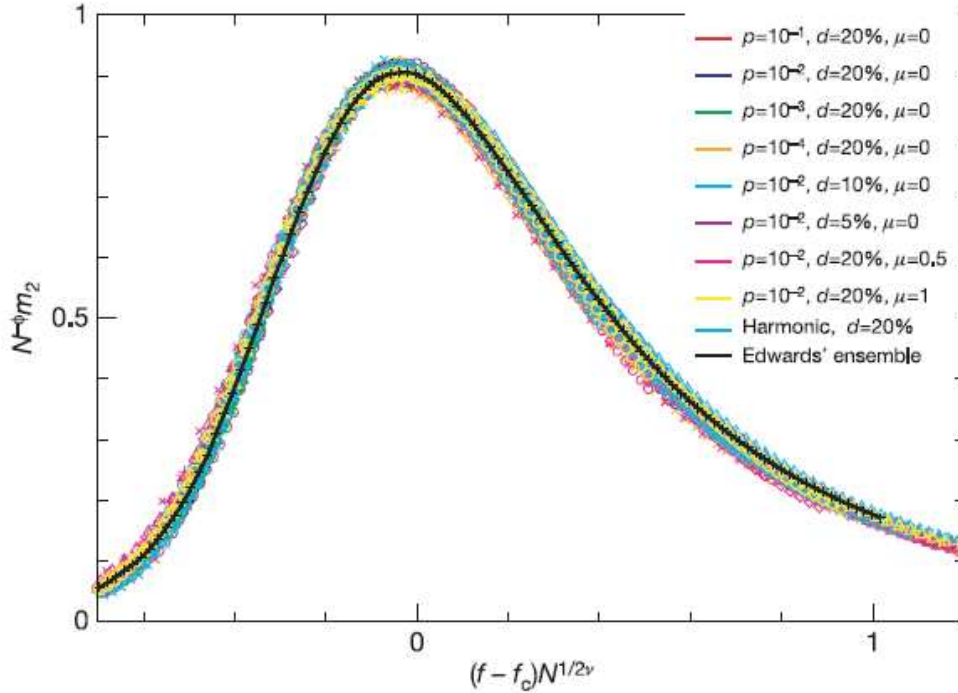


Figura 1.10: Curva universal del segundo momento de la distribución de tamaños de los componentes de una red granular. A medida que el parámetro $f = F / \langle F \rangle$ toma distintos valores, los enlaces que portan una fuerza menor se eliminan, lo que desagrega la red. Las curvas de muestras con distinta polidispersidad, presión p aplicada y diferente fricción μ colapsan en una sola curva donde los exponentes valen $\phi = 0,89$ y $\nu = 1,6$. Figura tomada de [84].

teóricamente un conjunto de esferas de distintos tamaños. Para simplificar su análisis supuso que los espacios entre las esferas que no estaban en contacto eran nulos. Esta simplificación hace que el sistema pueda reducirse a un conjunto de tetraedros que llenan todo el volumen. Dodds estudió la fracción de compactación y la conectividad de las esferas que componen el empaquetamiento.

Recientemente Ostojic *et al.* [84] han analizado la distribución de tamaños de los componentes de la red de contactos de empaquetamientos granulares generados mediante dinámica molecular. Los autores analizan empaquetamientos bidimensionales en los que varían la polidispersidad en tamaño de los granos, la fricción y la presión aplicada. El aspecto de las redes cambia drásticamente en función de estos parámetros. Así, para bajas polidispersidades se tienen redes con grandes dominios ordenados separados por zonas desordenadas; la ausencia de fricción produce empaquetamientos más densos que aquellos que presentan fricción; y al aumentar la presión sin variar los demás parámetros, la distribución de fuerzas se hace más estrecha. A pesar de estas diferencias, es posible encontrar una universalidad subyacente en las redes de fuerzas. Para ello, los autores definen el parámetro $f = F / \langle F \rangle$ donde F son las fuerzas normales en los contactos y generan diversas redes tomando las fuerzas que son mayores que f . Cuando $f = 0$ se tiene toda la red de contactos, pero a medida que se incrementa el valor de este parámetro la red se desagrega en grupos de granos cuyos componentes están conectados entre sí, pero desconectados de otros grupos. Los autores analizan la distribución de tamaños de estos grupos, eliminando del análisis el grupo más grande, al igual que se hace en la teoría de fenómenos críticos. El resultado es que el segundo momento m_2 de dicha distribución es una curva universal definida por dos exponentes

ϕ y ν , ver la Fig. 1.10. En efecto, las curvas correspondientes a distintas fricciones, polidispersidades y presiones aplicadas colapsan en una sola al representar $N^{-\phi}m_2$ frente a $(f - f_c)N^{1/2\nu}$. Aquí N es el número de granos y f_c un parámetro que depende de la muestra. Los valores de los exponentes son $\phi = 0,89$ y $\nu = 1,6$ y definen una clase de universalidad para la *colectividad* de las fuerzas obtenidas mediante el método numérico. La universalidad es la misma para el modelo de Hertz, el modelo lineal y la colectividad de Edwards, y difiere, en cambio, para el *q-model*, cuyos exponentes son $\phi = 0,69$ y $\nu = 3,1$.

El análisis de las redes de fuerzas permite hacer un estudio estructural de los medios granulares en el espíritu de los efectuados por otros autores [49] y por otros métodos [68, 70], donde ya se ha demostrado que investigar la estructura es un camino fructífero. En el presente trabajo se analizarán las características estructurales de un medio granular en situación tanto estática como dinámica.

Capítulo 2

Métodos numéricos.

En la literatura de medios granulares se discuten diversos métodos numéricos. Algunos de ellos son aplicables a todo tipo de sistemas, mientras otros sólo son válidos bajo determinadas aproximaciones. En la siguiente sección se presenta en detalle el método denominado dinámica molecular de partículas blandas que se ha utilizado en el presente trabajo. Este método se basa en un modelo de contacto que determina las fuerzas que aparecen en una colisión binaria. A partir de estas fuerzas se pueden integrar las ecuaciones de movimiento de todas las partículas. El método es aplicable, en principio, a sistemas tanto diluidos como densos o estáticos, aunque se utiliza mayoritariamente en el análisis de los medios granulares densos.

2.1 Dinámica molecular de partículas blandas.

Este método se desarrolló originalmente para calcular la interacción entre moléculas de un gas o un líquido en aproximación newtoniana [85]. Las ecuaciones a integrar son las de Newton con la fuerza dada por un potencial de interacción que consta de dos partes. Una ligeramente atractiva a distancias mayores que el tamaño de un átomo o molécula, y otra fuertemente repulsiva a distancias menores, cuando las nubes electrónicas se solapan levemente. Este método se aplica a los medios granulares truncando el potencial de interacción, que conserva su parte repulsiva a distancias que ahora se interpretan como inferiores al diámetro del grano, mientras que es nulo a distancias superiores. La interacción es, por tanto, de contacto y consistente en un ligero solapamiento de los granos en colisión.

Los detalles de la fuerza que experimentan las partículas dependen del modelo de contacto que se escoja [86]. Sin embargo, todos comparten algunas características necesarias para modelar un medio granular:

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

Una vez conocidos los detalles de la fuerza, el método de dinámica molecular integra las ecuaciones de Newton, para lo que será necesario conocer las posiciones y velocidades iniciales de todas las partículas. La integración numérica puede, en principio, efectuarse por cualquier método: desde

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

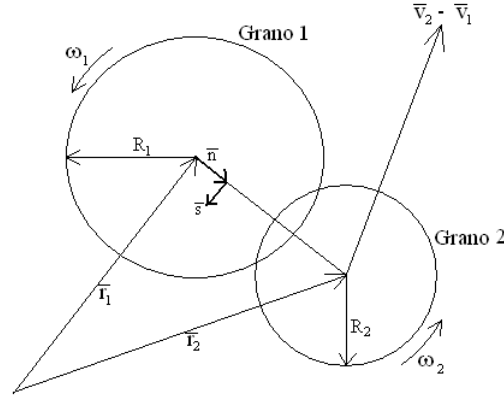


Figura 2.1: Esquema de la colisión de dos granos.

Euler a Runge-Kutta o métodos tipo predictor-corrector. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que no todos los métodos son igualmente óptimos a la hora de resolver un determinado problema.

En esta sección se analizan en detalle los elementos de que consta un algoritmo de dinámica molecular de partículas blandas (DM en adelante): expresión explícita de las fuerzas tanto en la dirección de la colisión como en la perpendicular [86] y método de integración de las ecuaciones de movimiento. La última sección está dedicada a la implementación eficiente [85, 87] de estos ingredientes. La exposición se restringe al caso bidimensional en el que hay dos grados de libertad traslacionales y uno de rotación.

2.1.1 Fuerzas de interacción.

Fuerza normal.

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

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

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

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

y el coeficiente de restitución

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

donde m_{eff} es la masa efectiva o reducida de los granos en colisión y v_n^f y v_n^i las velocidades relativas en la dirección normal posterior y anterior al choque respectivamente. El coeficiente de

restitución mide la energía que se pierde durante el choque, por eso viene dado por la duración del mismo, así como por el coeficiente γ_n que determina la energía disipada por el muelle amortiguado durante su movimiento.

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

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

En este caso el coeficiente de restitución no es constante, sino que depende de la velocidad de impacto, así como el tiempo de colisión [86]

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

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

Fuerza tangencial.

Esta fuerza está dada por la ley de Coulomb de la fricción, que establece que no hay deslizamiento de un cuerpo sobre otro a menos que la fuerza perpendicular a la línea de contacto sea superior a cierto umbral. Este umbral es la fuerza normal por el coeficiente de fricción estática. Si se supera este valor crítico, se produce deslizamiento y la fuerza tangencial pasa a ser la normal por el coeficiente de fricción dinámico. Se puede, por lo tanto, escribir para la fricción dinámica [86],

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

donde v_t es la velocidad relativa de las superficies en contacto

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

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

Una forma muy utilizada de evitar el anterior inconveniente es escribir [86]

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

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

La solución más extendida a los anteriores problemas consiste en unir Ec.(2.6) y Ec.(2.8) en una sola expresión [86]

$$F_t = -\text{mín}(\mu |F_n|, \gamma_t |v_t|) \text{sign}(v_t) \quad (2.9)$$

donde γ_t sigue siendo un parámetro sin interpretación física. Dándole un valor relativamente alto a este parámetro, la mayor parte del tiempo se está tomando el valor correcto para la fuerza

tangencial $\mu|F_n|$. A medida que las velocidades se van haciendo pequeñas, debido a la disipación, y el sistema se aproxima al régimen en que este término da problemas, la función *min* hará que se tome $\gamma_t|v_t|$ obteniendo un comportamiento regular.

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

Se puede implementar una fuerza de fricción estática sustituyendo Ec.(2.9) por [88]

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

donde

$$F_s = k_t\zeta - \gamma_tv_t \quad (2.11)$$

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

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

2.1.2 Integración de las ecuaciones de movimiento.

Una vez que elegido un modelo de contacto es posible calcular la aceleración de cada partícula y, de ella, la nueva velocidad y posición. Para llevar a cabo este cálculo existen múltiples métodos de distinta complejidad y precisión. En principio, es posible usar tanto el método de Euler como el de Runge-Kutta [89] en función de las necesidades de precisión y velocidad. Sin embargo, cuando se trata con sistemas hamiltonianos, una familia de métodos destaca como particularmente apropiada: los denominados métodos simplécticos. Se dice que las ecuaciones de movimiento tienen estructura simpléctica si se verifica [90]

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Así, antes de aplicar Ec.(2.21) el algoritmo calcularía las fuerzas con las posiciones y velocidades actuales. Puede comprobarse que este método de segundo orden conserva la energía de un sistema hamiltoniano mejor que un Runge-Kutta de cuarto orden [85]. Además, posee la patente ventaja de ser sencillo de implementar y, al efectuarse en tres etapas, es relativamente rápido.

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

Por último cabe mencionar los métodos predictor-corrector, de entre los cuales los más usados son los de Gear de cuarto y quinto orden [87]. Estos algoritmos constan de tres pasos

1. *Predictor.* A partir de las posiciones y sus derivadas hasta orden n en t se obtienen las mismas cantidades en $t + \delta t$ mediante expansiones de Taylor. Entre estas cantidades está la aceleración.
2. *Fuerzas.* Con las posiciones y velocidades predichas se calculan las fuerzas según el modelo de contacto y, de ellas, las aceleraciones. Estas serán diferentes de las calculadas en el primer paso, siendo su diferencia igual a cierto Δa .

3. *Corrector*. Las posiciones y sus derivadas sufren correcciones proporcionales a Δa . Los coeficientes de proporcionalidad están determinados para maximizar la estabilidad del método.

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

2.1.3 Implementación eficiente.

Realizar los cálculos descritos arriba para un gran número de partículas es una tarea muy costosa. Si además se desea un cálculo preciso se deberá trabajar con pasos de integración pequeños, aumentando linealmente el número de ciclos que debe ejecutar el algoritmo de cálculo. La implementación directa de los métodos expuestos daría lugar a un algoritmo excesivamente lento. Optimizar dicha implementación es un trabajo ineludible [85].

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

Listas de vecinos.

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

El cálculo por listas de vecinos procede así: antes de comenzar a integrar las ecuaciones de movimiento se elabora una lista que contiene en cada entrada un par de partículas tales que su separación es menor que una distancia crítica r_c prefijada. Esta distancia debe ser mayor que el alcance de la fuerza σ . En el caso de fuerzas de contacto $\sigma = R_1 + R_2$ siendo R_i el radio de una partícula². En cada paso de integración se recorre la lista de vecinos actualizando las distancias de cada par. Cada cierto número de pasos N_A se reelabora la lista. La actualización de las distancias de los vecinos es una operación de orden $O(N)$ y aunque la elaboración de la lista es de orden $O(N^2)$, sólo se realiza cada N_A pasos. Para calcular la fuerza se recorre la lista y se hacen los cálculos sólo para aquellas partículas que estén en contacto.

La elección de N_A puede ser crítica: si es muy pequeño no habrá ganancia apenas en tiempo de cálculo, si se toma demasiado grande, se perderán colisiones, resultando cálculos incorrectos. Una forma de automatizar el cálculo del valor óptimo en cada paso de integración es la siguiente: cuando se reelabora la lista de vecinos se calculan los dos máximos desplazamientos de entre todas las partículas (los desplazamientos se almacenan en una lista de tamaño N), cuando la suma de ambos es mayor que r_c se procede a reelaborar la lista de vecinos y se empieza de cero el cálculo de los dos máximos desplazamientos.

²Este requisito restringe el uso de las listas de vecinos a potenciales de interacción con una distancia de corte, como el presente, o que puedan truncarse por ser de decaimiento rápido o corto alcance, como el de Van der Waals. Este método no puede usarse con potenciales de decaimiento lento como, por ejemplo, el de Coulomb.

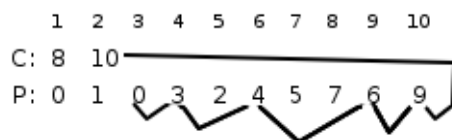


Figura 2.2: En este ejemplo la subcelda 2 contiene las partículas de índices 9, 6, 4, 3 y 0.

División del espacio en celdas.

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

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

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

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

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

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

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

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

```
for m1 = 1 to M
  for m2 = 1 to M
    mi1 = m2 * M + m1    subcelda actual
    for mi2 Subceldas_Vecinas
      se toma un grano de la
      subcelda actual y otro de la vecina
      for j1 = C(mi1)    los sucesivos se toman
                          como indique P(m1)
        for j2 = C(mi2)    los sucesivos se toman
                          como indique P(m2)
```

```

        si j1 y j2 son distintos se comprueba su distancia
        si j1 y j2 entran en contacto se calcula la fuerza
    end for
end for
end for
end for
end for

```

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

2.1.4 Comentarios finales.

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

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

2.2 Métodos numéricos en la literatura granular.

En la literatura granular se pueden encontrar diversos métodos numéricos, aplicables en distintas situaciones o bajo diversas aproximaciones:

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

El primero de ellos ha sido discutido en detalle en la sección precedente. A continuación se da una breve descripción del resto.

2.2.1 Dinámica Molecular de partículas duras.

A pesar de su nombre, este método es muy diferente de la dinámica molecular de partículas blandas [85, 91]. En primer lugar, las partículas no se solapan en absoluto, de ahí que se las considere duras. En segundo lugar, no hay fuerzas: cuando dos granos chocan intercambian sus velocidades de acuerdo con una regla de colisión predefinida.

El punto de partida consta de partículas con posiciones y velocidades conocidas, todas ellas separadas de manera que no haya dos en interacción. Las ecuaciones de Newton las obligan a seguir trayectorias balísticas perfectamente determinadas, pudiéndose calcular qué dos partículas serán las primeras en colisionar y en qué instante de tiempo. Los constituyentes del medio avanzan sus posiciones hasta dicho instante, se detienen y tiene lugar la colisión entre los dos granos implicados. La colisión consiste en la actualización de las velocidades según una regla que tiene en cuenta la conservación del momento lineal y que la energía cinética final difiere de la inicial de una manera que se supone conocida y medida por el coeficiente de restitución. Una vez actualizadas las dos velocidades implicadas en el choque, puede volverse a calcular el instante en que tendrá lugar la siguiente colisión. Todos los granos se mueven balísticamente hasta ese momento, en que las velocidades de los granos implicados en el choque son actualizadas de acuerdo con la regla de colisión. El proceso de cálculo de las trayectorias continúa así dirigido por eventos (colisiones).

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

$$v_1' = v_1 - \frac{1 + \epsilon}{2} v_n \quad (2.23)$$

$$v_2' = v_2 + \frac{1 + \epsilon}{2} v_n \quad (2.24)$$

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

$$\Delta E = -\frac{m_{12}}{2} (1 - \epsilon^2) v_n^2 \quad (2.25)$$

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

2.2.2 Dinámica de contactos.

Este método de integración del movimiento surgió para ser específicamente aplicado al tratamiento de fuerzas de contacto [92], por lo que ha sido muy utilizado en los medios granulares [93]. La dinámica de contactos calcula las fuerzas como las resultantes de dos restricciones que se deben cumplir en todo contacto. En primer lugar, los granos son rígidos e indeformables, no hay ningún solapamiento. La segunda restricción es el criterio de Coulomb: en un contacto no hay deslizamiento a menos que la fuerza tangencial sea mayor que un cierto límite, dado por el coeficiente de fricción estático multiplicado por la fuerza normal. Una vez conocidas las fuerzas, las nuevas posiciones y velocidades se determinan integrando la ecuación de movimiento de Newton.

Considérese el movimiento de dos granos. Ellos avanzan según las fuerzas que tengan aplicadas (como la gravitatoria o las que resulten de una colisión anterior) hasta que la distancia que separa sus superficies se hace nula o negativa. En ese momento, el tiempo deja de avanzar y se procede

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

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

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

2.2.3 Método de Monte Carlo.

Este método fue introducido para calcular las propiedades de un gas de partículas de baja densidad que obedece a la ecuación de Boltzmann [94, 95]. La celda de integración se divide en subceldas de tamaño L tal que

$$2d < L < l_{clm} \quad (2.26)$$

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

$$M_c = \frac{N_c(N_c - 1)\sigma v_{max}\tau}{2V_c} \quad (2.27)$$

donde N_c es el número de partículas en la subcelda, v_{max} es un límite superior para la velocidad relativa de las partículas colisionantes, σ es la sección transversal de choque o sección eficaz ($4R$ para esferas en dos dimensiones y $4\pi R^2$ en tres). En [95] Müller *et al.* igualan v_{max} al doble de la velocidad de la partícula más rápida. El número de colisiones debe ser proporcional a la velocidad relativa, para ello en Müller *et al.* adoptan el siguiente método: para un par de partículas i y j la colisión tiene lugar si

$$\frac{|\vec{v}_i - \vec{v}_j|}{v_{max}} < Z \quad (2.28)$$

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

2.2.4 Autómatas celulares.

Los modelos de red se formularon para resolver problemas de fluidos, sin embargo pueden adaptarse para tener en cuenta la disipación [96]. Considérese una red triangular a cada uno de cuyos nodos se asocian siete variables binarias v_i ($i = 0, 1 \dots 6$). Cada v_i ($i = 1 \dots 6$) es un vector a uno de los nodos vecinos, mientras que v_0 es el vector nulo. Se puede pensar en estos vectores como velocidades que llevarán a las partículas a los lugares apuntados, siendo v_0 el estado de reposo. En un instante dado cada una de las variables asociadas a un nodo puede estar ocupada o vacía. En el primer caso, en ese lugar habrá una partícula con la velocidad indicada por la variable. El número máximo de partículas por nodo es siete y el mínimo ninguna. El tiempo avanza en saltos discretos $t = 0, 1, 2, \dots$ en cada uno de los cuales tienen lugar dos procesos: colisión y propagación. En el primero, las partículas alteran sus velocidades debido a las colisiones según unas reglas. En la propagación, las partículas se mueven a los lugares indicados por sus velocidades. La figura Fig. 2.3 resume las reglas de colisión. A la izquierda aparece la velocidad de las partículas que están en un nodo dado, y a la derecha la situación final resultante. Si esta última puede ser una de dos equiprobables (debido a la simetría de la red) se elige una con probabilidad 0,5. El parámetro p es un número real comprendido entre 0 y 1. Tomando $p = 0$ las reglas de colisión conservan la energía y la cantidad de movimiento, mientras que $p \neq 0$ da lugar a un proceso disipativo. Las dos últimas líneas representan la colisión de dos partículas con una tercera en reposo. Como en cada nodo sólo puede haber una partícula en reposo, inmediatamente después del proceso de colisión las dos partículas incidentes saltan aleatoriamente a uno de los nodos vecinos para ocupar la posición de reposo.

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

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

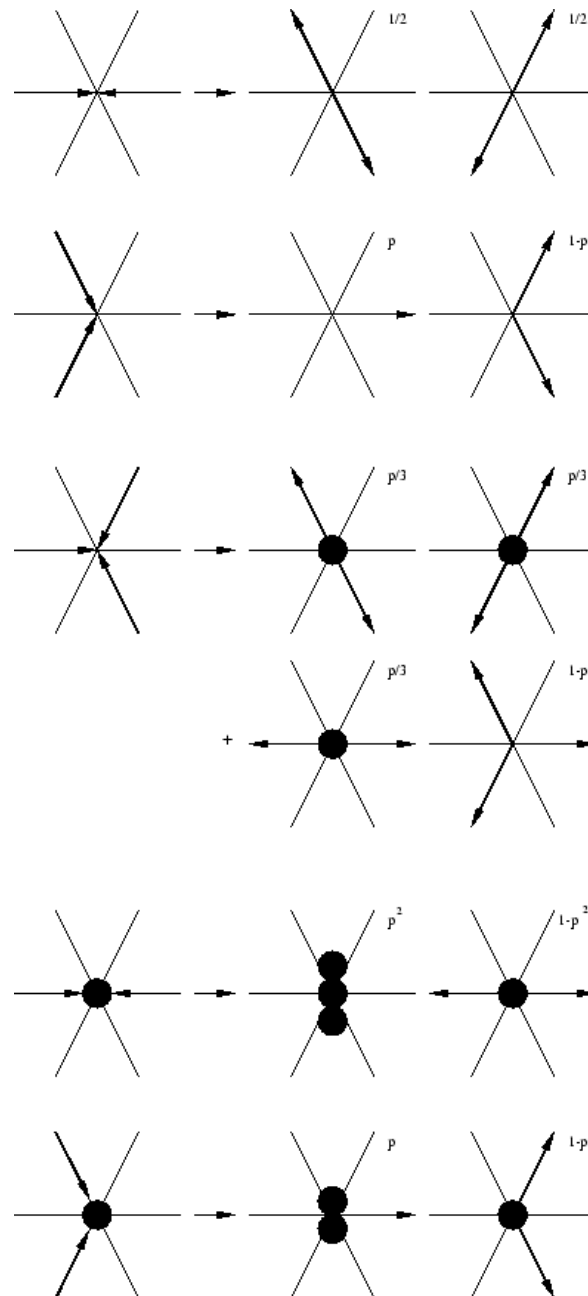


Figura 2.3: Reglas de colisión para un modelo de red. Fuente: <http://www.hlr.de/people/mueller/papers/honnef99/node3.html>.

Capítulo 3

Flujo y fluctuaciones.

En este capítulo se analizará el comportamiento de un silo bidimensional que se descarga por la acción de la gravedad a través de un orificio practicado en su base. Se presentarán resultados sobre el flujo en estado estacionario en función del tamaño del orificio de salida, así como el comportamiento transitorio.

3.1 Introducción.

El punto de partida es la ley de Beverloo Ec.(1.20) que relaciona el flujo de descarga con el diámetro del orificio, como se explicó en el capítulo introductorio. En el presente capítulo, el modelo de contacto utilizado para realizar los cálculos numéricos es el de Hertz con fricción dinámica dado por las ecuaciones Ec.(2.4) y Ec.(2.9). Los valores de los coeficientes en unidades reducidas son $k_n = 10^5 \text{ mg}/d^{1.5}$, $\gamma_n = 100 \text{ m}\sqrt{g/d}$, $\gamma_t = 300 \text{ m}\sqrt{g/d}$, $\mu = 0,5$. El paso de integración es $1,25 \cdot 10^{-4}\tau$ con $\tau = \sqrt{d/g}$. Las paredes del silo están construidas con el mismo tipo de granos que los que forman el medio y forman un contenedor de $50d$ de anchura por $100d$ de altura.

3.2 Flujo estacionario.

Las medidas del flujo se realizan sobre un conjunto de 5000 discos idénticos. Inicialmente los granos están colocados en una red regular y se les asignan velocidades aleatorias tomadas de una distribución gaussiana. Las partículas comienzan entonces a caer bajo la acción de la gravedad y pasan primero a través de una tolva, como se ve en Fig. 3.1. Este proceso pretende romper las correlaciones que puedan originarse en el estado ordenado inicial. A la salida de la tolva hay un silo rectangular en el que los granos se depositan. Una vez todos los granos están en el silo y que la energía cinética se ha reducido debido a la disipación, se abre un orificio en la base del silo y comienza el proceso de medida. Durante el tiempo que duran las medidas, los granos que se descargan son reinyectados de nuevo en el silo, tan cerca como es posible de los que están en la superficie y con velocidades semejantes. De esta manera no se perturba el proceso de descarga y se mantiene una altura constante durante el mismo, para garantizar que el flujo no depende de dicha altura.

El flujo se mide en número de granos por bloque de tiempo, o pasos de integración, haciéndose 100 medidas de 10^4 pasos de integración cada una. Durante los 10000 primeros pasos de integración no se hacen medidas para dar tiempo a que el flujo sea estacionario. Los resultados pueden verse en la figura Fig. 3.2 en la que cada punto representa la media de las 100 medidas. Puede comprobarse

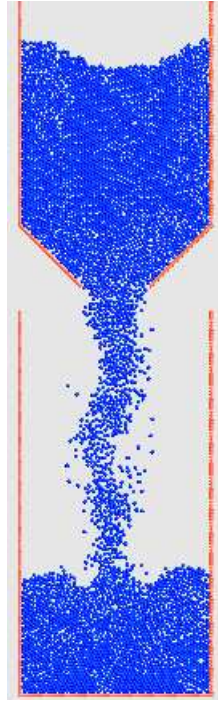


Figura 3.1: Imagen del proceso de llenado del silo, descargando los granos mediante una tolva, obtenida mediante el método numérico explicado en el texto.

claramente que la ley de Beverloo es válida para orificios de salida grandes, pero no ajusta el flujo cuando el orificio de salida es pequeño. Este hecho se ha observado experimentalmente en silos en tres y dos dimensiones [32] obteniéndose, además, un buen acuerdo entre los resultados experimentales y numéricos en el caso bidimensional.

3.2.1 Flujo resuelto en el tiempo.

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

$$w(t) \equiv \frac{W(t)}{\langle W(t) \rangle} \quad (3.1)$$

donde el promedio es temporal. En la Fig. 3.3 puede verse el flujo reducido en función del tiempo para tres orificios de salida distintos. Cuando el orificio es pequeño el flujo presenta grandes oscilaciones en torno al valor medio que se atenúan considerablemente a medida que el orificio se hace mayor. Las fluctuaciones pueden caracterizarse por su desviación estándar

$$\sigma_w = \sqrt{\langle w^2 \rangle - \langle w \rangle^2} = \sqrt{\langle w^2 \rangle - 1} \quad (3.2)$$

y representando esta cantidad en función del diámetro del orificio de salida se obtiene el resultado mostrado en la Fig. 3.3. Si el diámetro adimensional del orificio es menor que, aproximadamente, 9 la desviación estándar decae como $(D/d)^{-2}$, mientras que para diámetros mayores se hace constante. Buscando una mayor caracterización de estas fluctuaciones, se elabora el histograma de la amplitud de oscilación Δw separando los resultados obtenidos con orificios de tamaño $9d$ o menor por un lado y los mayores por otro. Los histogramas normalizados y con la amplitud

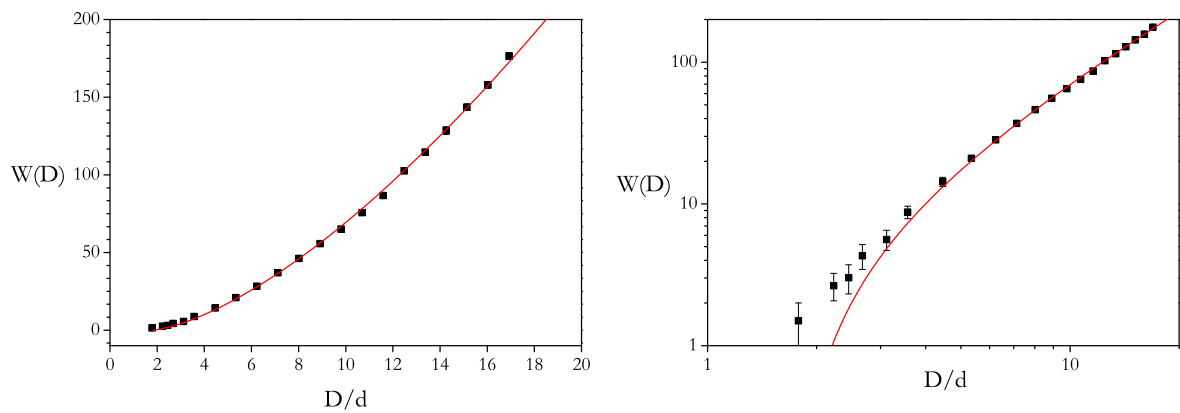


Figura 3.2: Flujo en número de granos por bloque de tiempo en función del diámetro del orificio de salida, en escala lineal (izquierda) y logarítmica (derecha). La línea roja es un ajuste a la ley de Beverloo en dos dimensiones.

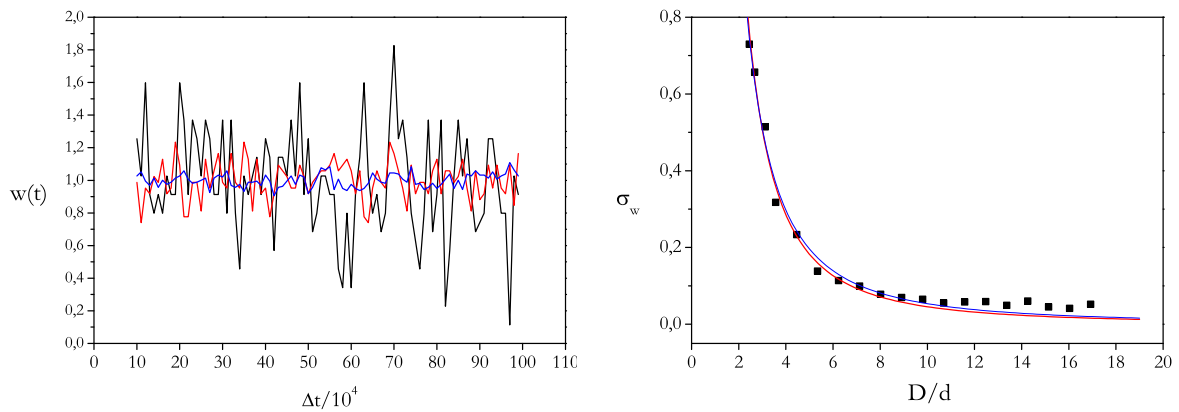


Figura 3.3: Izquierda: flujo reducido en función del número de pasos de integración para orificios de diámetro adimensional 3,56(negro), 6,24(rojo) y 16,04(azul). Derecha: desviación estándar de la amplitud de oscilación del flujo reducido en función del diámetro del orificio de salida. Un ajuste potencial de todos los datos, en azul, da una dependencia $(D/d)^{-1,87}$. La línea roja es la curva $(D/d)^{-2}$.

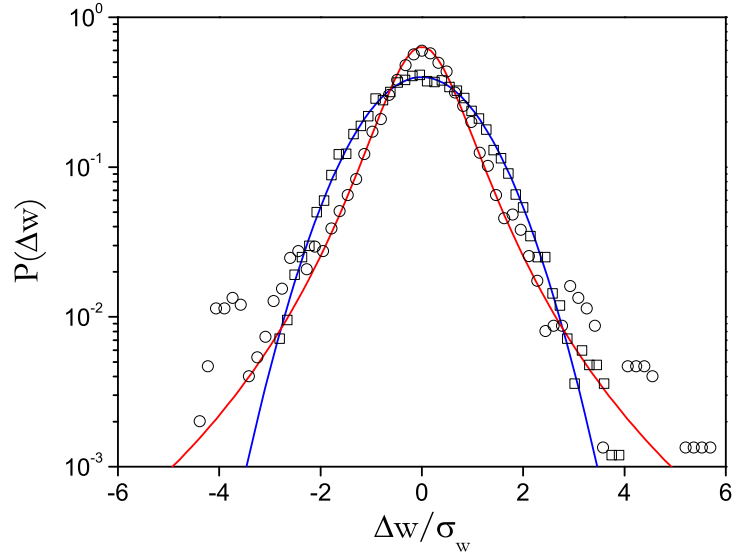


Figura 3.4: Función de distribución de la amplitud de oscilación del flujo reducido. Los círculos corresponden a flujos medidos con orificios menores que $9d$, los cuadrados para el resto. La línea azul es una gaussiana y la roja es la Ec.(3.3).

escalada según la desviación estándar se muestran en la Fig. 3.4. El histograma de las fluctuaciones correspondientes a orificios grandes es gaussiano, mientras que para orificios pequeños está dado por

$$P(\Delta w) = \frac{2/\pi}{\left(1 + (\Delta w)^2\right)^2}. \quad (3.3)$$

Es decir, en la región donde la ley de Beverloo no es válida las fluctuaciones dependen del radio de salida y siguen una función de distribución no gaussiana, mientras que en la región donde se aplica la ley de Beverloo, las fluctuaciones son constantes en su amplitud y siguen una distribución gaussiana. Estos resultados pueden interpretarse en función del movimiento individual de los granos y se efectuará en una sección posterior.

3.2.2 Densidad en la región fluidizada.

Una forma sencilla de obtener la ley de Beverloo es la siguiente. En la figura Fig. 3.5 se ha marcado la región que ocupan los ΔN granos que van a caer en el intervalo Δt . Este número es

$$\Delta N = \rho DL = \rho Dv\Delta t \quad (3.4)$$

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

$$W = \frac{\Delta N}{\Delta t} = \rho Dv \quad (3.5)$$

siguiendo la hipótesis del arco de caída libre, $v \sim \sqrt{gD}$ y se obtiene la ley de Beverloo en dos dimensiones. En tres dimensiones el razonamiento es totalmente análogo. Se ha comprobado que

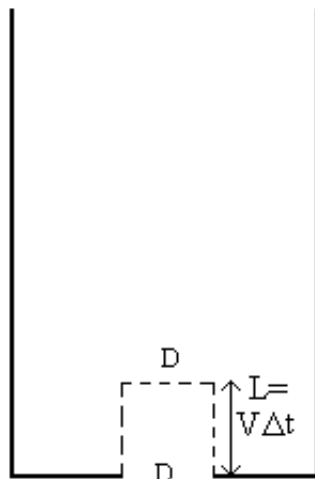


Figura 3.5: Esquema para obtener la ley de Beverloo. Aquí D es el diámetro del orificio de salida, V es la velocidad media de los granos en la zona recuadrada por la línea discontinua y Δt el tiempo en el que caen los granos presentes en esa zona.

esta ley no es apropiada cuando el tamaño del orificio de salida se hace comparable al de los granos. A la vista de Ec.(3.5) puede verse que si se mantiene la hipótesis del arco de caída libre sólo es posible cambiar la densidad para encontrar una ley semejante y que dé cuenta de los resultados.

Para medir la densidad en la región de salida se toma una región cuadrada de las dimensiones del orificio de salida. Si se toma la base de este cuadrado coincidente con la base del silo, ocurre que, en la región de flujo intermitente, hay intervalos de tiempo en los que una parte del cuadrado está vacía. Además el área de la región de medida que no está ocupada cambia en el tiempo introduciendo fuertes oscilaciones en las medidas. Para evitar esto, se ha tomado la base del cuadrado de medida a una altura de unos seis diámetros de grano. Los resultados que se obtienen se muestran en la figura Fig. 3.6, donde la densidad es la fracción de volumen ocupada por los granos. La densidad puede ajustarse con la expresión

$$\rho = \rho_0 \left(1 - ae^{-bD}\right) \quad (3.6)$$

Parece contraintuitivo que la densidad sea menor con orificios pequeños que con grandes, pues aquellos al tender a obstruir el flujo deberían dar lugar a mayores densidades. El resultado se comprende si tenemos en cuenta que las medidas se realizan en la región fluidizada. Cuando el orificio de salida es pequeño y tienden a formarse arcos, el material es inyectado poco a poco en dicha región desde las zonas más altas del silo (donde la densidad sí es alta) y tiene, por tanto, una baja densidad. A medida que se incrementa el tamaño del orificio de salida, se inyecta más material en la zona fluidizada y a mayor ritmo, pues cada vez hay menor probabilidad de que se formen arcos y, por tanto, la densidad aumenta. A partir de un determinado tamaño de orificio, la probabilidad de que se forme un arco será prácticamente nula en adelante, con lo que el ritmo al que se introduce material, y su densidad, en la zona fluidizada no cambian más.

Asumiendo la presencia de arcos existe un argumento que nos lleva a la expresión Ec.(3.6). Con referencia a la figura Fig. 3.5 se define el número de filas de granos que caen en el intervalo

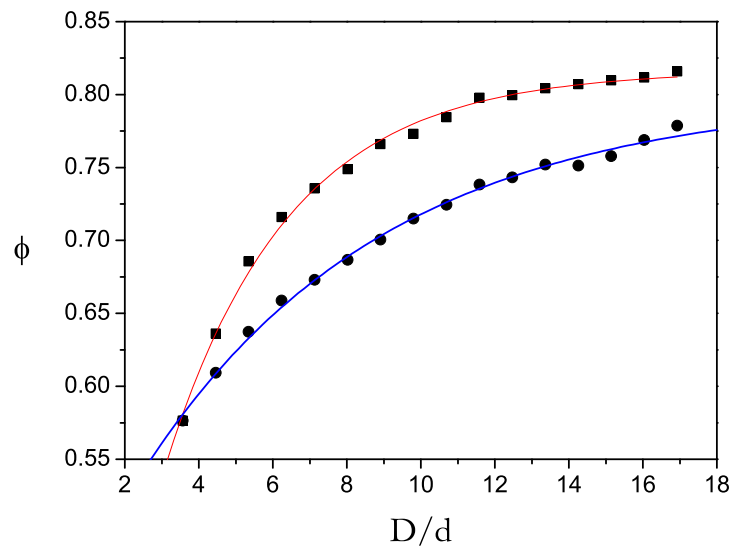


Figura 3.6: La densidad del medio en la zona de caída. La densidad se mide en términos de la fracción de compactación: fracción de volumen ocupado por los granos sobre el volumen total del área de medida. Cuadrados y círculos corresponden a dos formas distintas de cambiar el tamaño de la zona de medida con el orificio de salida. Ambas pueden ajustarse con la Ec.(3.6) como muestran las líneas continuas.

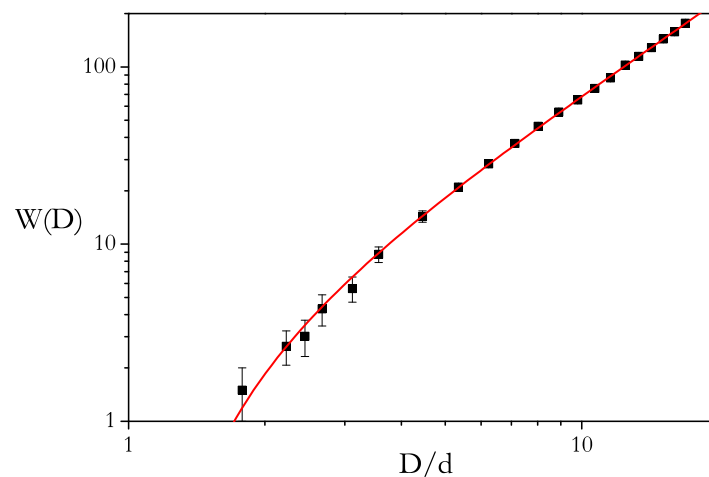


Figura 3.7: El flujo ajustado con la Ec.(3.14) mostrando que la nueva ley es válida para todo el rango de observación.

Δt

$$N_F = \frac{\Delta N}{D} = \rho v \Delta t \quad (3.7)$$

y el número de granos en la región de caída es $\Delta N = N_F D$. Cuando el tamaño del orificio se hace pequeño empiezan a formarse arcos, hecho que se manifiesta en el aumento de las fluctuaciones del flujo, cuyo efecto será hacer que en Δt caigan $N'_F < N_F$ filas de granos. Puede escribirse N'_F como N_F menos el número de arcos. Para estimar este último, se asume que la distribución de longitudes de los arcos es la misma que la de las cadenas de fuerza que se dan en los medios granulares, que a su vez puede suponerse dada, en primera aproximación, por una función exponencial [48]

$$P(l) = \beta e^{-\beta l} \quad (3.8)$$

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

$$N'_F = N_F - AP(l > l_0) = N_F - Ae^{-\beta l_0} \quad (3.9)$$

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

$$\frac{\Delta N'}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} (N_F - Ae^{-\beta l_0}) D \quad (3.10)$$

$$= \frac{1}{\Delta t} (\rho v \Delta t - Ae^{-\beta l_0}) D \quad (3.11)$$

$$= \rho \left(1 - \frac{A}{\rho v \Delta t} e^{-\beta l_0} \right) v D \quad (3.12)$$

y, recapitulando,

$$w' = \rho' D v \quad (3.13)$$

$$\rho' = \rho \left(1 - Ae^{-bD} \right) \quad (3.14)$$

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

En la figura Fig. 3.7 se representa el flujo ajustándolo con la ley Ec.(3.14), y puede comprobarse que ajusta todo el rango de observación.

3.3 Fluctuaciones.

En esta sección se estudiará el movimiento individual de los granos en el régimen de flujo estacionario y durante el transitorio que tiene lugar entre el instante en que se abre el orificio en la base del silo y el establecimiento del régimen estacionario. El modelo de contacto y protocolo de simulación son los mismos que en la sección precedente.

3.3.1 Perfiles de velocidad y densidades de probabilidad.

Usando tres tamaños de orificio diferentes ($3,8d$, $11d$ y $16d$) se estudia la evolución del perfil de la velocidad vertical en el interior del silo. La razón para elegir estos tamaños del orificio está en que pertenecen a dos regímenes diferentes. Para el primero el flujo es intermitente, mientras que

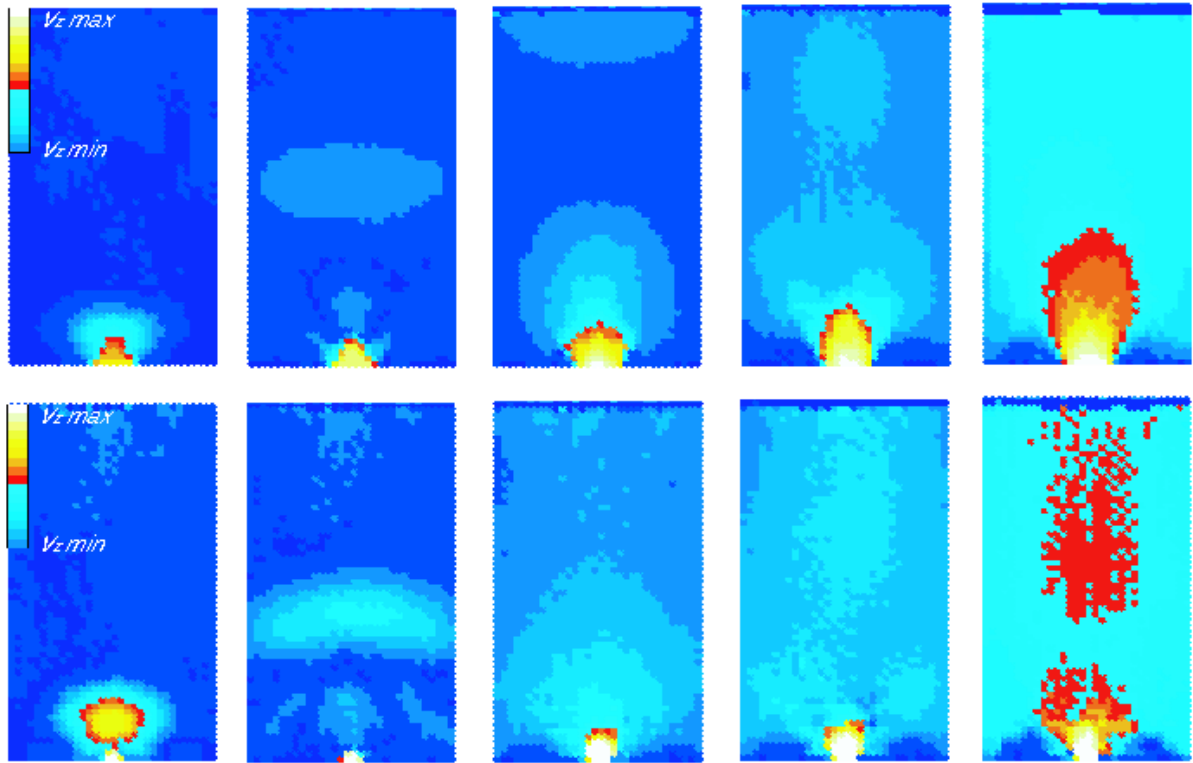


Figura 3.8: Perfil promedio de la componente vertical de la velocidad en distintos estadios de su evolución. El panel superior muestra los resultados para un orificio de salida de $11d$, el inferior, para el orificio de $3,8d$. Puede constatarse el movimiento colectivo de grupos de granos antes de establecerse el perfil estacionario característico.

no lo es para los dos últimos. El perfil de velocidad se calcula desde el instante en que se abre el orificio en la base del silo hasta que el flujo se hace estable. Los resultados finales se obtuvieron promediando 20 realizaciones independientes del proceso de descarga. Los resultados en la figura Fig. 3.8 muestran el perfil para los orificios de $3,8d$ y $11d$. Es evidente que grupos de granos se mueven hacia abajo originando estructuras, que podemos denominar “burbujas”, que se mueven hacia arriba. Estas burbujas corresponden a grupos de granos que se desplazan hacia abajo a velocidad mayor que los granos del resto del silo, y su evolución revela un régimen intermitente al inicio de la descarga. Cuando las burbujas desaparecen, el flujo alcanza su estado estacionario con un perfil de velocidades característico. El perfil de velocidad

$$v(x, z) = \frac{Q}{\sqrt{4\pi Bz}} \exp -x^2/4Bz \quad (3.15)$$

medido a media altura da un valor del parámetro $B = 2,2 \pm 0,2d$ en muy buen acuerdo con los resultados experimentales [23].

La evolución del perfil de velocidad con el orificio más pequeño muestra diferencias. En primer lugar, dicha evolución es más lenta, observándose más burbujas que en el caso de agujeros grandes. La intermitencia es más acusada en este caso y, con el orificio de tamaño $3,8d$, no llega a verse una transición a un perfil estacionario como el que muestran los orificios más grandes. El hecho de que los granos se muevan más lentamente junto con la observada intermitencia, permite especular que se estén formando arcos en la región del orificio que obstruyen el flujo.

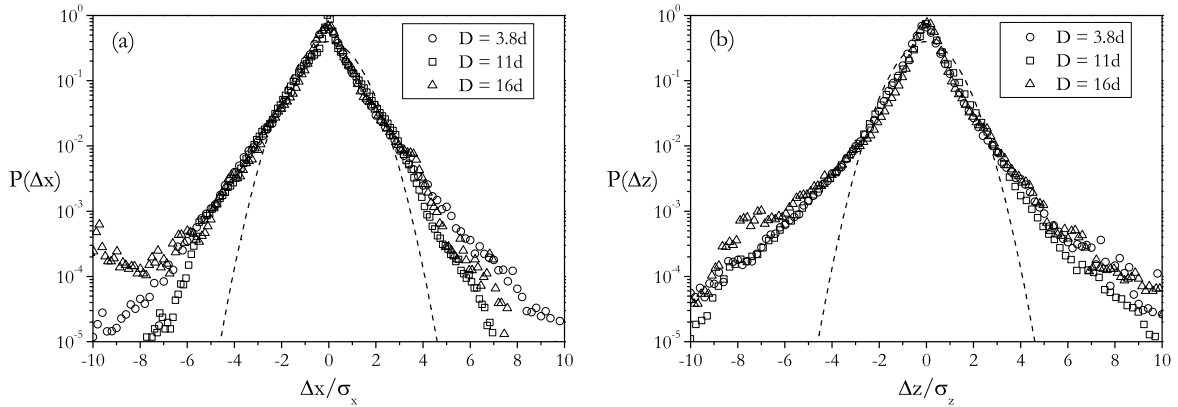


Figura 3.9: Funciones de distribución normalizadas de los desplazamientos horizontales (a) y verticales (b). El desplazamiento medio de las partículas es inferior al diámetro de un grano y están normalizados por la desviación estándar. La línea a trazos es una gaussiana.

Durante el proceso de descarga se miden los movimientos individuales de los granos. Para comparar los resultados obtenidos con los experimentales de Choi *et al* [28], se elige un tiempo de muestreo tal que el desplazamiento medio de los granos durante el mismo sea, aproximadamente, $0,01d$ (similar al de los experimentos). Las partículas fueron medidas en ventanas de tamaño 10×10 , 15×15 y 20×20 situadas en el centro del silo, obteniéndose los mismos resultados en todos los casos. Para calcular las funciones de distribución de los desplazamientos se substraen el desplazamiento debido al flujo medio.

Las funciones de distribución de los desplazamientos inferiores al diámetro de un grano en el régimen estacionario se muestran en la figura Fig. 3.9, donde los desplazamientos se han normalizado por su desviación estándar. Las distribuciones en las componentes horizontal y vertical son esencialmente iguales y, además, son no gaussianas. Aparecen claras desviaciones del comportamiento gaussiano tanto en la región central como en las colas, que son mucho más anchas. Al calcular las distribuciones correspondientes a desplazamientos mayores que el diámetro de un grano, se observa que las horizontales tienden a gaussianas, mientras las verticales continúan presentando desviaciones importantes. Esto puede verse en la figura Fig. 3.10 donde, además, puede verse que la convergencia hacia una distribución gaussiana de la componente horizontal de los desplazamientos para el agujero más pequeño es más lenta que para los agujeros mayores. Estos resultados son consistentes con resultados experimentales [28, 97].

En la figura Fig. 3.11 se muestra el desplazamiento cuadrático medio frente a la distancia recorrida (medida en diámetros de grano d). En el caso de un orificio de salida grande se aprecian claramente dos regiones. Una, para desplazamientos en torno al diámetro de un grano y menores, en que se observa un comportamiento balístico como el transporte molecular en fluidos [98]; y otra, para desplazamientos superiores al diámetro de un grano, en que el comportamiento es de difusión normal.

El desplazamiento cuadrático medio en el caso del orificio más pequeño no muestra una transición clara. Los desplazamientos son superdifusivos (la pendiente es mayor que 1 y menor que 2) tanto a tiempos cortos como a tiempos largos. Otra indicación de que el régimen difusivo anómalo es persistente para este orificio se observa en el hecho de que las colas de las distribuciones no tienden claramente hacia una gaussiana. En [28] se observa un comportamiento superdifusivo de los movimientos inferiores al diámetro para todos los orificios de salida estudiados. Esto puede

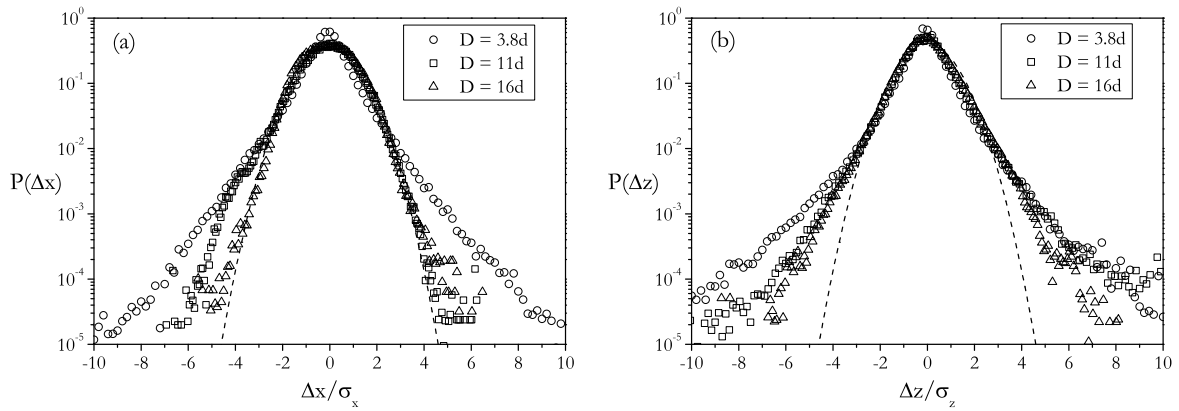


Figura 3.10: Funciones de distribución normalizadas de los desplazamientos horizontales (a) y verticales (b). El desplazamiento medio de las partículas es mayor que el diámetro de un grano y están normalizados por la desviación estándar. La línea a trazos es una gaussiana.

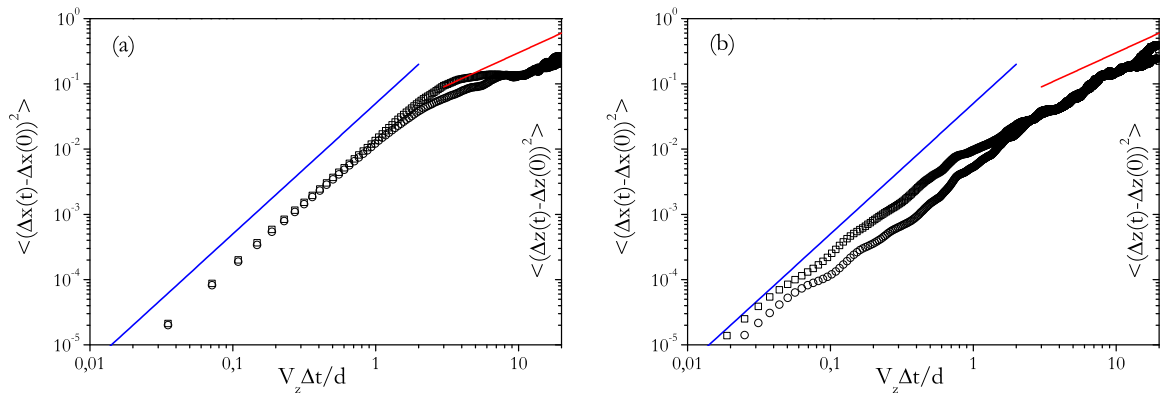


Figura 3.11: Desplazamiento cuadrático medio en las direcciones horizontal (círculos) y vertical (cuadrados). Con un orificio de salida de $16d$ (a) se ve claramente la transición del régimen balístico al difusivo para desplazamientos mayores que el diámetro de un grano. Si el orificio de salida es pequeño, $3,8d$ (b), no hay una transición clara y el movimiento parece superdifusivo a todas las escalas. La línea azul tiene pendiente 2 y la roja $4/3$.

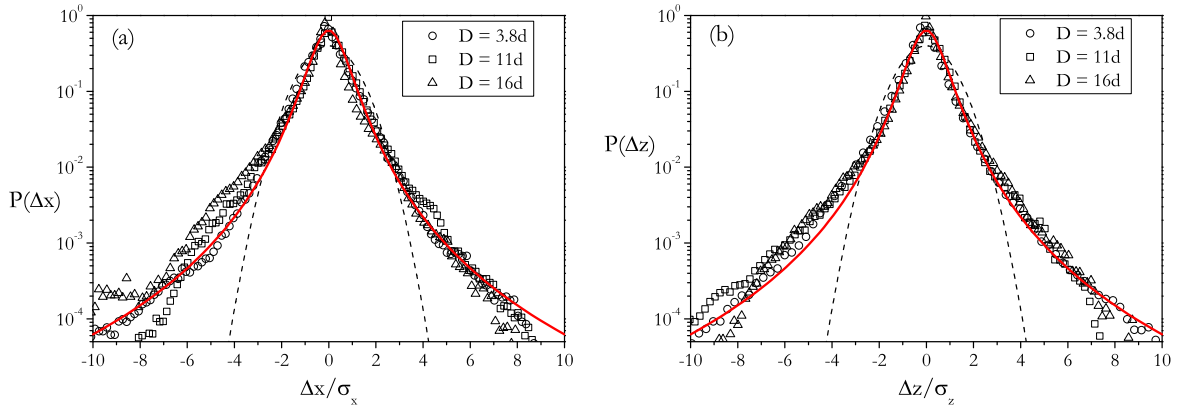


Figura 3.12: Funciones de distribución de los desplazamientos horizontales (a) y verticales (b) al inicio de la descarga: desde que se abre el orificio hasta que la altura del material dentro del silo descende dos diámetros de grano. La línea de trazos es una gaussiana y la continua es la función EC 3.18.

deberse a que las medidas se realizan sobre los granos que están junto a las paredes del silo.

Los resultados numéricos muestran que el modelo difusivo de Mullins [27] subestima la “longitud de difusión” B para el que obtenía $3/8d$. Además, tanto el modelo numérico como los resultados experimentales [25] muestran que este valor cambia ligeramente con la altura respecto a la base del silo, estando en buen acuerdo entre ellos. Por otro lado, el modelo difusivo de Bazant [29] predice el valor correcto del parámetro B pero no da lugar a los comportamientos superdifusivos observados.

3.3.2 Inicio de la descarga.

Estudiar el inicio de la descarga es interesante para comprender el origen de las obstrucciones y si existe un radio crítico por encima del cuál éstas ya no se producen [32]. En el caso de orificios de salida grandes, el perfil de velocidades estacionario de la Fig. 3.8 se alcanza cuando la superficie libre del silo descende unos dos diámetros de grano. Por tanto, a fines de tomar medidas, se considera “inicio de la descarga” el periodo de tiempo comprendido entre la apertura del orificio de salida y el instante en que la superficie del material ha bajado una distancia $2d$. En la figura Fig. 3.12 se muestran las distribuciones de los desplazamientos horizontales y verticales para los tres orificios de salida estudiados. Las distribuciones son claramente no gaussianas y difieren ligeramente de las obtenidas en el caso de flujo desarrollado. Esto es de esperar puesto que al inicio de la descarga los movimientos de las partículas estarán más correlacionados debido a que están más compactadas.

Los desplazamientos cuadráticos medios escalan aproximadamente como $\langle \Delta x^2 \rangle \cong \langle \Delta z^2 \rangle \propto t^{4/3}$ para todos los orificios estudiados, como puede verse en la figura Fig. 3.13. El tiempo durante el que se toman las medidas en esta fase no es suficiente para mostrar una transición a la difusión normal. Esto es compatible con la observación experimental de que es necesario esperar un tiempo, fácilmente mensurable, para que el flujo sea estacionario. La duración de este lapso de tiempo depende del tamaño del orificio de salida.

Este comportamiento superdifusivo no puede ser descrito mediante una ecuación de difusión normal. En la literatura pueden encontrarse dos intentos importantes de generalizar la ecuación

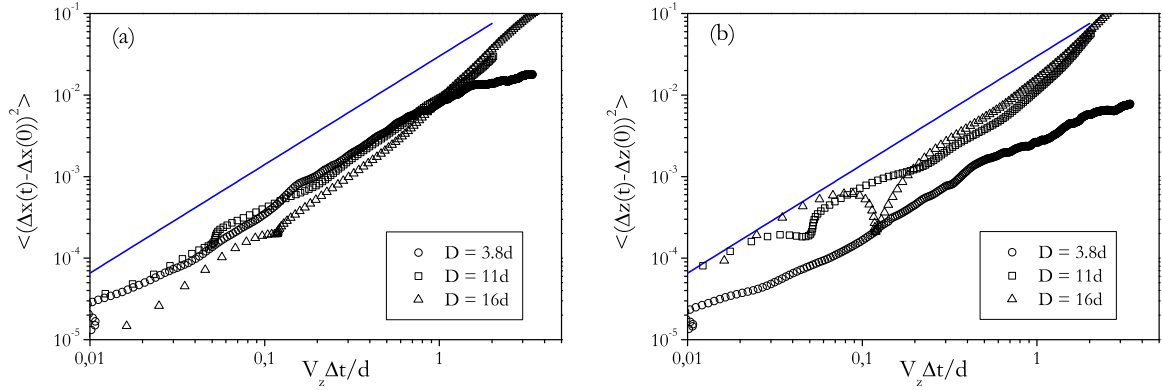


Figura 3.13: Desplazamiento cuadrático medio en las direcciones horizontal (a) y vertical (b) durante el inicio de la descarga. El movimiento parece superdifusivo en todos los casos. Las líneas azules tienen pendiente $4/3$.

de difusión para dar cuenta de fenómenos de difusión anómala, superdifusión y subdifusión. Uno de ellos consiste en tomar derivadas fraccionarias [99]. Esta aproximación no será discutida aquí pues las soluciones de la ecuación en derivadas fraccionarias son funciones estables de Lévy, una de cuyas propiedades es que el segundo momento de la distribución no es finito. Como se verá en breve, no parece ser este el caso de las funciones que podrían describir los resultados numéricos obtenidos. La otra forma de generalizar la ecuación de difusión es hacerla no lineal, en el caso más sencillo se tiene

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 [p(x, t)]^\nu}{\partial x^2} \quad (3.16)$$

donde ν es un número real. El origen microscópico de esta ecuación ha sido analizado por muchos autores [100–102], especialmente en el contexto del formalismo de la mecánica estadística no extensiva, introducida por Tsallis [103, 104]. Este formalismo redefine la entropía de manera que se convierte en una cantidad no extensiva. Cuando se maximiza la entropía con las restricciones habituales de la mecánica estadística, se obtienen funciones de distribución que son leyes de potencias. La ecuación Ec.(3.16) puede resolverse obteniéndose, en el caso unidimensional [105]

$$p(x, t) = \frac{A_q}{\sqrt{3-q}(Dt)^{1/(3-q)}} e_q^{-x^2/[(3-q)(Dt)^{2/(3-q)}} \quad (3.17)$$

donde $q = 2 - \nu < 3$ es un parámetro denominado índice entrópico. El desplazamiento cuadrático medio está dado por $\langle x^2 \rangle \propto t^{2/(3-q)}$. Comparando esta expresión con los resultados numéricos $\langle x_2 \rangle \cong \langle z^2 \rangle \propto t^{4/3}$ podemos estimar el índice entrópico $q = 3/2$ y sustituirlo en la Ec.(3.17) para obtener, normalizando con la desviación estándar,

$$p(x) = \frac{2/\pi}{(1+x^2)^2}. \quad (3.18)$$

Esta función corresponde a la línea sólida de la figura Fig. 3.12. Puede comprobarse que esta función describe muy bien la función de distribución de los desplazamientos al inicio de la descarga. El segundo momento de la distribución Ec.(3.18) es finito, como ocurre con las soluciones de Ec.(3.17) si se toma $q < 5/3$.

El escenario de difusión anómala parece relacionado con las correlaciones en el movimiento de los granos que son de esperar al inicio de la descarga. A medida que la descarga continúa estas correlaciones se atenúan en la dirección perpendicular al flujo y se observa, entonces, que las funciones de distribución son gaussianas. Las correlaciones en la dirección del flujo son más persistentes. Sin embargo, a tiempos largos (correspondientes al flujo estacionario) y para desplazamientos mayores que el diámetro de un grano, se observa una transición a un régimen de difusión normal tanto en el desplazamiento cuadrático medio como en las funciones de distribución, en el caso de orificios de salida grandes. Cuando el orificio de salida es pequeño, no hay una transición clara debido a que las intermitencias en el flujo hacen que persistan las correlaciones.

La expresión Ec.(3.18) que da las probabilidades de los desplazamientos de los granos es la misma expresión que se encontró para ajustar las fluctuaciones del flujo en silos con agujeros pequeños Ec.(3.3). Este resultado puede entenderse de la siguiente forma: al tomar la variable $w = W(t)/\langle W(t) \rangle$ estamos haciendo una “reducción” del movimiento de muchos granos al de uno sólo, por eso oscila en torno a 1. El hecho de que esta cantidad experimente una fluctuación positiva (un pico hacia arriba) o negativa será debido, respectivamente, al hecho de que un grano entre o salga (en el movimiento aleatorio de los granos ambas son posibles) de la región “fluidizada” desde la que caen. Estas probabilidades de entrar o salir de dicha región están dadas por las funciones de distribución de los desplazamientos individuales de los granos, que se reflejan, por tanto, en la cantidad w .

3.3.3 Interpretación microscópica.

El comportamiento de los granos al inicio de la descarga puede entenderse haciendo uso de una versión modificada de la hipótesis de las burbujas [29]. Esta modificación consiste en suponer que las burbujas no se mueven conservando su integridad, como harían si fuesen el análogo de partículas, sino que el número de granos que forma parte de -o está afectado por- una burbuja varía con el tiempo. La idea de estudiar el comportamiento estadístico de una partícula de masa variable fue introducida por Ausloos y Lambiotte en [106]. En esta sección se siguen las ideas y cálculos expuestos en el citado trabajo. Supóngase que una burbuja es una partícula cuya masa fluctúa en un tiempo característico τ y que los posibles valores instantáneos de la masa están dados por una función de distribución $g(m)$. Esta imagen es razonable porque a medida que una burbuja evoluciona y se desplaza dentro del silo, la heterogeneidad del medio provoca que no esté afectando al mismo número de granos en todo momento.

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

$$f(u) = \sqrt{\frac{\beta m_b}{2\pi}} e^{-\frac{m_b u^2}{2}} \quad (3.19)$$

La relajación a ese valor tendrá lugar en una escala de tiempo característica t_R que depende de la masa de la partícula y las propiedades del medio. Si se verifica que $t_R \ll \tau$ entonces la distribución asintótica estará dada por

$$f(u) = \int dm g(m) \sqrt{\frac{\beta m_b}{2\pi}} e^{-\frac{m_b u^2}{2}} \quad (3.20)$$

Para continuar se precisa una función de distribución de masas. La varianza de una variable aleatoria con media nula está dada por la media de los cuadrados de los valores que toma. La distribución chi-cuadrado es, por definición, la función de distribución de la variable aleatoria $\beta = \sum_{i=1}^{2c} X_i^2$, donde X_i son variables independientes distribuidas según una gaussiana con $\langle X_i \rangle = 0$ y

$2c$ es el número de grados de libertad. Por tanto, una chi-cuadrado parece una elección natural para las fluctuaciones de la masa de la partícula. Entonces, se tiene

$$g(m) = \frac{1}{b\Gamma(c)} \left(\frac{\beta}{b}\right)^{c-1} e^{-\beta/b} \quad (3.21)$$

cuya media es bc y la desviación estándar es b^2c . Ahora es posible integrar integrar Ec.(3.20) para obtener

$$f(u) = \sqrt{\frac{b}{2\pi}} \frac{\Gamma(c+1/2)}{\Gamma(c)} \frac{1}{(1+\frac{b}{2}u^2)^{c+1/2}} \quad (3.22)$$

Imponer la misma escala que en los datos $\langle u^2 \rangle = 1$ implica $2/b = 1$ y eligiendo $c = 3/2$ se obtiene

$$f(u) = \frac{2/\pi}{(1+u^2)^2} \quad (3.23)$$

que es la misma función encontrada antes para describir los resultados numéricos.

En rigor, el resultado alcanzado es válido para las burbujas, mientras que los datos presentados y analizados corresponden al movimiento de granos individuales. Para relacionar ambas descripciones se utiliza la definición de burbuja dada en [29]

$$\Delta \mathbf{R}_g = -\omega(\mathbf{r}_g, \mathbf{r}_b) \Delta \mathbf{R}_b \quad (3.24)$$

que significa: cuando una burbuja se mueve $\Delta \mathbf{R}_b$ cerca de \mathbf{r}_b ocasiona un desplazamiento $\Delta \mathbf{R}_g$ en el grano que está en \mathbf{r}_g . La función ω se denomina función de influencia y se extiende al área ocupada por la burbuja. Un cálculo sencillo basado en la conservación de volumen, y asumiendo que la función es escalar y simétrica, da $\omega = \Delta\phi/\phi^2$ donde ϕ es la fracción de volumen. Suponiendo una variación de volumen $\Delta\phi/\phi = 1\%$ y una densidad $\phi = 0,8$ que es lo que típicamente se encuentra en los cálculos (los discos monodispersos tienden a estar muy empaquetados); entonces $\omega \simeq 10^{-3}$. Si se introduce la ecuación Ec.(3.24) en Ec.(3.23) se comprueba que la función de influencia corresponde a la desviación estándar del movimiento de los granos individuales. El valor estimado para esta función es el mismo que el obtenido para la desviación estándar de los granos, lo que cierra la deducción.

Una imagen microscópica del inicio de la descarga basada en el desplazamiento de burbujas de masa variable parece, por tanto, apropiada para describir la estadística del movimiento de los granos observada. A medida que la descarga continúa, las burbujas desaparecen y se establece un perfil estacionario de velocidades. Si la presencia de colas anchas en las distribuciones de los desplazamientos se debe a correlaciones, inducidas por el hecho de que las burbujas ocasionan movimientos cooperativos en los granos a los que afectan, su presencia en el estado estacionario, ver figura Fig. 3.10, indica que estas correlaciones decaen lentamente. La misma figura muestra que las correlaciones se atenúan más lentamente con agujeros pequeños debido que atascos parciales mantienen el flujo de burbujas durante más tiempo.

En el presente capítulo se ha analizado la descarga de un silo por gravedad tanto en el régimen estacionario como en el transitorio. En el primer caso, se ha puesto de manifiesto la necesidad de modificar la ley del flujo para tener en cuenta las desviaciones que surgen cuando el orificio de salida es pequeño, comparable al diámetro de los granos. En la literatura existen numerosos estudios del flujo de silos, pero apenas se encuentran análisis del inicio de la descarga. En este capítulo hemos abordado este análisis mostrando las diferentes evoluciones del perfil de velocidad en función del tamaño del orificio de salida, y se ha efectuado un estudio de la dinámica microscópica del inicio de la descarga.

Capítulo 4

Arcos en depósitos granulares.

En este capítulo se estudiarán los arcos que se forman en depósitos verticales en los que el material granular sedimenta por la acción de la gravedad. El modelo de contacto utilizado es el modelo de Hertz con fricción estática dado por las expresiones Ec.(2.4) y Ec.(2.10). Los valores de los parámetros del modelo son $\mu = 0,5$, $k_n = 10^5 \text{ mg}/d^{1,5}$, $\gamma_n = 300 \text{ m}\sqrt{g/d}$, $k_t = \frac{2}{7}k_n$ y $\gamma_t = 200 \text{ m}\sqrt{g/d}$ con un paso de integración $\tau = 10^{-4} \sqrt{d/g}$.

4.1 Arcos.

Los arcos son estructuras de varias partículas que se encuentran en los depósitos granulares formados de manera no secuencial. Durante la sedimentación del lecho granular algunas partículas se depositan a la vez, tocándose y apoyándose unas en las otras. Se denomina arcos o puentes [107] a estos conjuntos de partículas mutuamente estabilizados, el arco no incluye a las partículas que lo rodean constituyendo su base. Típicamente, se encuentra que el 70% de las partículas forman parte de un arco en tres dimensiones, y 60% en dos [108, 109]. Los arcos determinan propiedades globales del empaquetamiento como su densidad o el número medio de contactos y, además, gobiernan la aproximación al estado atascado en sistemas como los silos [110].

Para identificar los arcos presentes en un depósito granular es preciso conocer la historia del proceso de sedimentación, pues a partir únicamente de la configuración final, no es posible decir cuáles de los varios contactos de cada grano son los responsables de su estabilidad, siendo dos el número de contactos necesarios en el caso bidimensional.

4.2 Protocolo de identificación de arcos.

Antes de describir el protocolo por el que se identifican los arcos se explicarán los conceptos que entran en la definición de arco:

Partículas de soporte: se considera que dos partículas en contacto con el grano i pueden servir de *soporte* sólo si cada partícula está a un lado de i y la línea que une los dos puntos de contacto, que se denominará *segmento de contacto*, está por debajo del centro de masas de i .

La presencia de las fronteras formadas por las paredes del silo hace necesario tener en cuenta las siguientes observaciones: si uno de los contactos es con la pared, se considera que la coordenada vertical de éste es la misma que la de la partícula i . Los granos que alcanzan el reposo en la base del depósito son siempre estables. Si el grano i tiene, en un instante dado, un sólo contacto, éste es

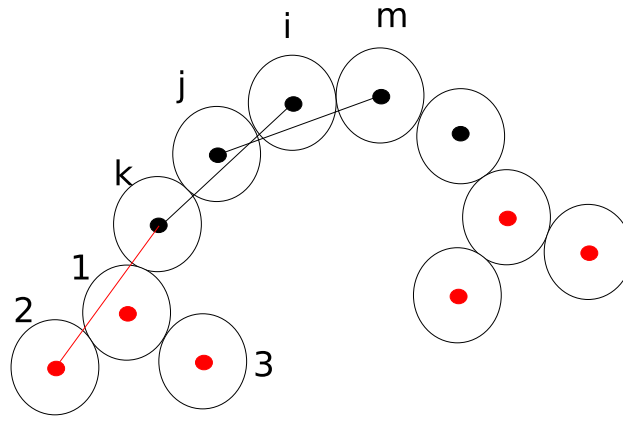


Figura 4.1: Esquema de un arco típico. Las partículas j y m están a ambos lados de la partícula i con el segmento que une sus centros de masas pasando por debajo del centro de masas de i . Por tanto, j y m soportan a la partícula i . De la misma manera, la partícula j está soportada por k e i . En este ejemplo, j soporta a i (con m) e i soporta a j (con k) y, por tanto, i y j son mutuamente estables. Del mismo modo se puede razonar que k y j son mutuamente estables, pero no k y 1 porque k no puede soportar a 1 : el segmento de contacto $k-2$ está por encima del centro de masas de 1 y el par $k-3$ está al mismo lado de 1 . Por tanto, 1 será una de las bases del arco.

considerado un contacto estabilizante *potencial* únicamente si su centro de masas está por debajo del de i . Los contactos con las paredes no se consideran un contacto estabilizante *potencial*.

Partículas mutuamente estables: Dos partículas i y j son mutuamente estables si i soporta a j y j soporta a i .

Para identificar los arcos es preciso encontrar las dos partículas que son soporte de cada grano del sistema, una vez identificados los soportes los arcos pueden identificarse de la siguiente forma [111]: primero se encuentran todas las partículas mutuamente estables -que se definen como *directamente conectadas*- y los arcos se encuentran como cadenas de partículas directamente conectadas.

Los conceptos introducidos para definir un arco pueden verse de forma gráfica en la figura Fig. 4.1 dónde se representa de forma esquemática un arco típico, como los que se pueden formar en un depósito granular.

A medida que el depósito se forma, los granos colisionan y se separan muchas veces, de forma complicada. Cada vez que se produce un contacto, es posible saber si alguna de las dos partículas contribuye a la estabilidad de la otra y almacenar esta información, o borrarla si los granos se separan. Cuando ya no se produzcan cambios en la información de cada grano, el depósito se considerará formado y cada partícula tendrá dos contactos responsables de su estabilidad (el número total de contactos será mayor).

Para identificar los contactos estabilizantes se mantiene, a lo largo del proceso de sedimentación, una lista doble que contiene los contactos estabilizantes de cada grano. Así, el lugar k -ésimo de la lista contiene los índices de los granos que, en ese instante, dan soporte a la partícula k -ésima. Al principio, todas las entradas están vacías y se van llenando y actualizando a medida que progresa la sedimentación. Para llenar la lista se utiliza un protocolo, detallado a continuación, que se aplica iterativamente *en cada paso de integración* las veces que sea necesario, hasta que la lista no cambia, y entonces se avanza un paso de tiempo en el algoritmo numérico.

Se llamará $nR(i)$ y $nL(i)$ a las entradas que contienen los índices de los contactos estabilizantes (derecho e izquierdo) de la partícula i . Si la partícula i carece de contactos ambos contienen -2 ; si sólo hay un contacto, entonces $nR(i)$ (o $nL(i)$) contiene el índice del grano correspondiente y $nL(i) = -2$ (o $nR(i) = -2$); si un contacto es con una pared, entonces $nR(i) = -1$ (o $nL(i) = -1$). Hay seis posibles situaciones que pueden surgir dependiendo de la situación de estabilidad de la partícula antes de la actualización, y dentro de cada caso se presentan distintas opciones en función de las nuevas posiciones de las partículas tras actualizar las posiciones. Algunas situaciones plausibles no se han considerado bien por no ser posibles en la práctica o porque son extremadamente poco probables. La figura Fig. 4.2 muestra un resumen de los casos más relevantes.

Caso (a): Aquí el grano i reposaba sobre la base del contenedor. Se comprueba si permanece en dicha situación; si no lo está, se pone $nR(i) = nL(i) = -2$.

Caso (b): El grano i estaba soportado (antes de la actualización de posiciones) por dos partículas cuyos índices estaban almacenados en $nR(i)$ y $nL(i)$. Se comprueba si estas partículas siguen dando soporte a i ; si no, los soportes se redefinen tomando en cuenta varias posibles situaciones:

(1) $nR(i)$ y $nL(i)$ aún están en contacto con i , $nR(i)$ está aún a la derecha y $nL(i)$ a la izquierda y el segmento de contacto está bajo el centro de masas de i ; entonces, $nR(i)$ e $nL(i)$ no cambian.

(2) Ni $nR(i)$ ni $nL(i)$ están en contacto con i , entonces $nR(i) = nL(i) = -2$.

(3) Si sólo falta uno de los contactos, éste se pone a -2 . Además, se comprueba que el restante está en el lado que le corresponde y por debajo de i ; de no ser así, también este contacto es puesto a -2 .

(4) $nR(i)$ y $nL(i)$ están aún en contacto con i , pero uno de los dos ha cambiado de lado (supóngase que $nR(i)$ se ha desplazado hasta la izquierda de i). Entonces, (*i*) $nL(i)$ será, de los dos contactos, el que menor coordenada vertical posea, y (*ii*) $nR(i) = -2$.

(5) $nR(i)$ y $nL(i)$ están aún en contacto con i , cada uno en el lado que le corresponde pero el segmento de contacto ya no está por debajo del centro de masas de i . Entonces, se pone $nR(i) = -2$ ó $nL(i) = -2$, el que tenga mayor coordenada vertical.

Caso (c): Este caso corresponde a un grano con un primer contacto estabilizante *potencial*. Supóngase que éste corresponde a $nR(i)$. Es necesario comprobar que $nR(i)$ permanece en su lugar y si un nuevo contacto puede completar la condición de estabilidad.

(1) $nR(i)$ está aún en contacto con i y a su derecha. Entonces, se busca una partícula j (o pared) que esté en contacto con i de manera que el segmento de contacto esté por debajo del centro de masas de i . Si se encuentra, se pone $nL(i) = j$.

(2) $nR(i)$ está aún en contacto con i , pero se ha desplazado a la izquierda. Entonces, $nL(i) = nR(i)$ y $nR(i) = -2$.

(3) $nR(i)$ no está en contacto con i , entonces $nR(i) = -2$.

Caso (d): Este caso es similar al (b) pero una de las paredes verticales del contenedor toma el papel de una de las partículas que dan soporte a i . Supóngase que i se apoya en la pared derecha, es decir, $nR(i) = -1$. Los soportes se redefinen de acuerdo con las siguientes posibles situaciones:




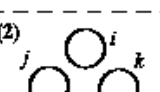
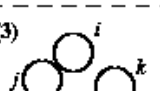
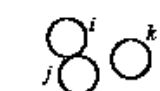


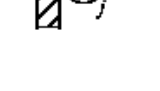
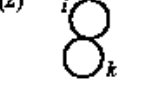

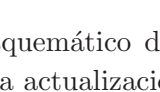
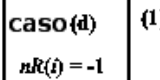




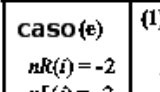
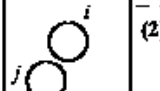



caso (a) $nR(i) = -1$ $nL(i) = -1$	(1) 	$nR(i) = -1$ $nL(i) = -1$
	(2) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
caso (b) $nR(i) = k$ $nL(i) = j$	(1) 	$nR(i) = k$ $nL(i) = j$
	(2) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
	(3) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = j$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
caso (c) $nR(i) = k$ $nL(i) = -2$	(1) 	$nR(i) = k$ Si i toca a j y el CM está bajo el segmento de contacto $n(i)=j$ o -1 respectiva- mente
	(2) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = k$
	(3) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
caso (d) $nR(i) = -1$ $nL(i) = j$	(1) 	$nR(i) = -1$ $nL(i) = j$
	(2) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
	(3) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = j$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
caso (e) $nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$	(1) 	$nR(i) = -1$ $nL(i) = -1$
	(2) 	$nR(i) = -2$ $nL(i) = j$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$
		$nR(i) = -2$ $nL(i) = -2$

Figura 4.2: Resumen esquemático de los posibles estados de estabilidad de un grano i en un momento dado junto a la actualización que le corresponde.

- (1) $nR(i)$ y $nL(i)$ están aún en contacto con i , $nL(i)$ está a la izquierda y el centro de masas de i está por encima del segmento de contacto; entonces, $nR(i)$ y $nL(i)$ no cambian.
- (2) Ni $nR(i)$ ni $nL(i)$ están en contacto con i , entonces, $R(i) = nL(i) = -2$.
- (3) O bien $nR(i)$ o bien $nL(i)$ no está en contacto con i . Entonces, (i) el contacto perdido se pone a -2 ; (ii) si el contacto restante es $nR(i)$ (la pared), entonces $nR(i) = -2$, si no, comprobar que $nL(i)$ está aún a la izquierda y por debajo de i ; y si no lo está, $nL(i) = -2$.
- (4) $nR(i)$ y $nL(i)$ están aún en contacto con i , pero $nL(i)$ no está a la izquierda de i ; entonces, $nR(i) = nL(i)$ y $nL(i) = -2$.
- (5) $nR(i)$ y $nL(i)$ están aún en contacto con i , $nL(i)$ está aún a la izquierda pero el centro de masas de i no está por encima del segmento de contacto; entonces, $nR(i) = nL(i) = -2$

Case (e): Este caso corresponde a un grano que estaba en el aire ($nR(i) = nL(i) = -2$) antes de actualizar las posiciones. Es preciso comprobar si hay nuevos contactos y si son soportes potenciales. Previamente se ha comprobado que i está cayendo, no subiendo tras un rebote. Hay dos posibles situaciones:

- (1) El grano i entra en contacto con la base del contenedor, entonces $nR(i) = nL(i) = -1$.
- (2) El grano i entra en contacto con otro j ; si i tiene coordenada vertical mayor que j se pone $nR(i) = j$ ó $nL(i) = j$, según en qué lado esté j .

4.3 Resultados en lechos agitados verticalmente.

El estudio de las propiedades de los arcos se realiza con 512 discos monodispersos de diámetro d que llenan una caja de $13,91d$ de ancho y agitando verticalmente el sistema con diversas amplitudes. Inicialmente, los discos se colocan al azar con alturas comprendidas entre 0 y $100d$, y se les asignan velocidades aleatorias con una distribución gaussiana. Los discos caen bajo la acción de la gravedad y se considera que el sistema ha sedimentado cuando las listas $nR(i)$ y $nL(i)$ permanecen sin cambios en 10^4 pasos de integración.

Un batido se realiza moviendo la caja en la dirección vertical durante el medio periodo positivo de una función seno de amplitud A y frecuencia ω . Para una amplitud de excitación dada se realizan 1000 batidos. Las propiedades del depósito se estudian en función de la intensidad de batido $\Gamma = A\omega^2/g$.

En la figura Fig. 4.3 se muestran los resultados obtenidos para la fracción de compactación, el número de coordinación de soporte y el número de arcos por disco. El número de coordinación de soporte es el número de coordinación calculado teniendo en cuenta únicamente aquellos contactos que son soporte de, al menos, un grano. Este número es interesante porque se relaciona directamente con los arcos presentes en el sistema [109]:

$$\langle Z \rangle_{\text{soporte}} = 2 \left[1 + \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N n(s) \right]. \quad (4.1)$$

Aquí N es el número de granos en el sistema y $n(s)$ es el número de arcos de s granos. Los números de coordinación Z y Z_{soporte} coinciden cuando en el sistema no hay ningún contacto que no sea soporte de alguna partícula.

En la figura Fig. 4.4 se muestra el resultado del proceso de batido en dos casos, uno de intensidad baja con $\Gamma = 0,71$ y otro, alta $\Gamma = 4,99$. El sistema aparece muy ordenado a bajas intensidades de batido lo que se refleja en la alta fracción de compactación y el correspondiente

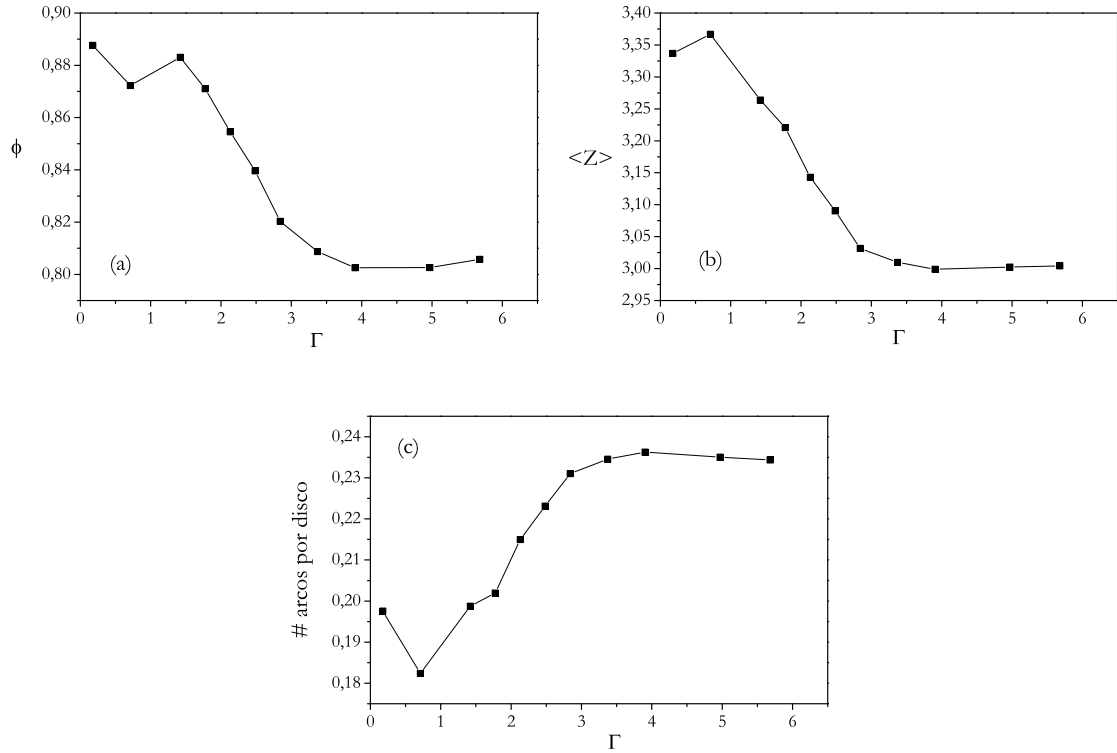


Figura 4.3: Fracción de compactación (a), número de coordinación de soporte (b) y número de arcos por disco (c) tras 10^3 batidos, cada punto se obtiene volviendo a llenar la caja.

alto valor del número de coordinación. En este caso el número de arcos es pequeño. Al aumentar la intensidad de batido el sistema se desordena gradualmente y todas las magnitudes cambian de forma suave hasta, aproximadamente, $\Gamma \simeq 5$, punto a partir del cuál permanecen aproximadamente constantes. A medida que se forman más arcos en el sistema, la densidad y el número de coordinación disminuyen.

El comportamiento de la fracción de compactación es semejante al que se observa en los experimentos [60], en la denominada rama reversible. La posibilidad de esta similitud se explora en más detalle llevando a cabo una variación del protocolo experimental: en lugar de batir el sistema en varios puntos Γ , se hace un sólo batido y el valor de la intensidad de batido se cambia muy lentamente $\Delta\Gamma = 0,0134$. El protocolo empieza en $\Gamma = 0$, alcanza un valor máximo de $\Gamma = 6,41$ y vuelve a bajar a $\Gamma = 0$. Este protocolo se repite varias veces para promediar los resultados.

En la figura Fig. 4.5b puede verse que este protocolo reproduce resultados similares a los experimentales. La fracción de compactación del sistema presenta una rama reversible, es decir, la curva de la densidad cae sobre los mismos puntos al aumentar y disminuir la intensidad de batido, tras una primera curva ascendente. Este resultado es interesante pues señala la posibilidad de obtener estados atascados sin necesidad de someter al sistema a un largo proceso de batido en cada punto.

En la figura Fig. 4.5a se muestran los resultados del número de coordinación y número de arcos calculados en la rama reversible. El comportamiento es análogo al observado con el primer protocolo, Fig. 4.3, en el que cada punto correspondía a 1000 batidos y el sistema se llenaba de nuevo para calcular cada punto, no se cambiaba Γ de manera continua, como ahora. Ambos

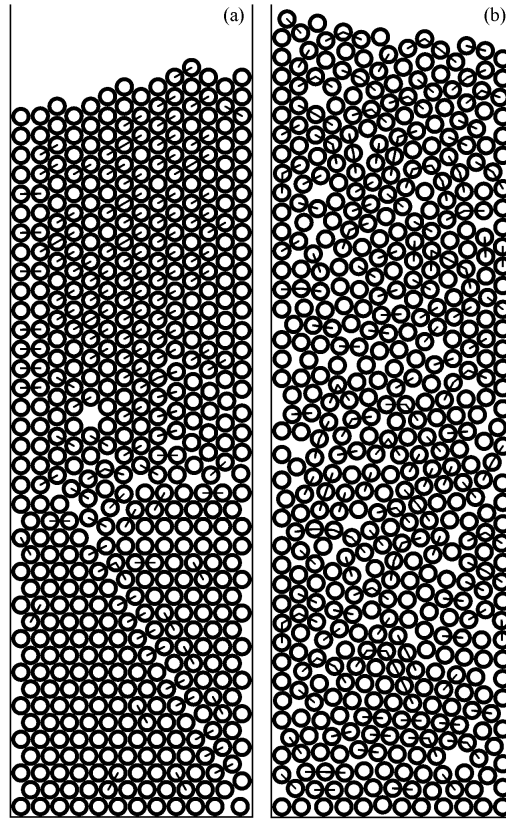


Figura 4.4: Configuraciones obtenidas con $\Gamma = 0,71$ (a) y $\Gamma = 4,99$ (b).

números de coordinación presentan comportamientos semejantes. El número de coordinación de soporte tiene valores menores que Z y varía en un rango menor, esto es indicativo de que el sistema presenta un número mayor de los que son necesarios para la estabilidad, tal como se la considera en este análisis. El sistema se desordena gradualmente a medida que se incrementa la intensidad de batido, aumentando el número de arcos que elevan el volumen ocupado por los granos y disminuyendo el número de contactos. La fracción de compactación presenta un mínimo en torno a $\Gamma \simeq 4$ para ascender ligeramente a mayores intensidades de batido. Este resultado es compatible con resultados experimentales en tres dimensiones, donde también se observa un mínimo en la rama reversible [60].

4.4 Propiedades de los arcos.

En la figura Fig. 4.6 se muestra la distribución de tamaños de los arcos $n(s)$ para un caso de alta intensidad de batido $\Gamma = 4,99$ y otro de baja intensidad $\Gamma = 0,71$. Cuando el batido es intenso, el número de arcos es mayor, mientras que un batido suave induce un mayor reacomodamiento que resulta en menos arcos y un sistema más compacto. Las curvas se aproximan en la zona de arcos pequeños y se cruzan en $S = 2$, resultando que el número de granos que no pertenecen a ningún arco ($n(s) = 1$) es mayor para intensidades bajas de batido. La distribución obtenida para bajo batido presenta un decaimiento aproximadamente exponencial, mientras que para batidos mayores la distribución sólo se puede ajustar mediante un polinomio de segundo grado, en escala semilogarítmica.

En la figura Fig. 4.7 se muestra la estadística de la extensión horizontal de los arcos y se

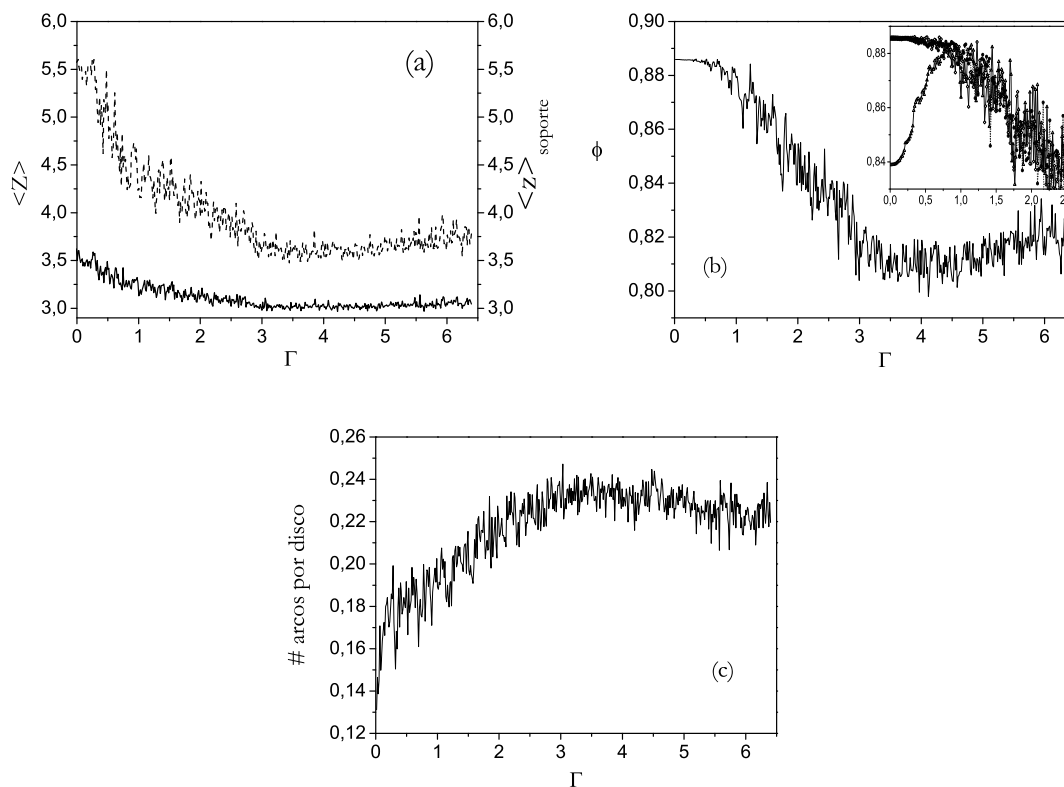


Figura 4.5: Números de coordinación (en línea continua el de soporte) (a), fracción de compactación (b) y número de arcos por disco (c). Cada punto es un sólo batido y la caja no vuelve a llenarse, se cambia la intensidad de batido en $\Delta\Gamma = 0,0134$. Dentro de la figura (b) se muestran los datos correspondientes a distintas realizaciones del protocolo de batido. La rama que parte de $\phi \simeq 0,84$ es la obtenida tras llenar la caja y aumentar la intensidad de batido. El resto de datos son los obtenidos al disminuir (símbolos macizos) y aumentar (símbolos huecos) la intensidad de batido. Los datos de la figura principal son un promedio.

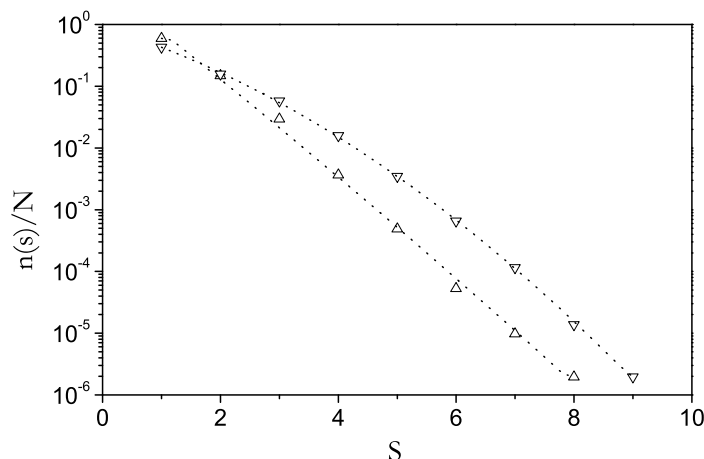


Figura 4.6: Distribución de tamaños de arcos para $\Gamma = 4,99$ (triángulos hacia abajo) y $\Gamma = 0,71$ (triángulos hacia arriba), ajustadas mediante un polinomio de segundo y primer orden, respectivamente. El dato $s = 0$ corresponde al número de discos que no forman parte de ningún arco.

compara con un modelo teórico [112] basado en un paseo aleatorio restringido. La extensión horizontal del arco es la proyección en el eje horizontal del segmento que une los centros de los granos que están a ambos extremos del arco. Se muestran los resultados obtenidos a alta y baja intensidad de batido para arcos compuestos por dos, tres y cuatro partículas. A fracciones de compactación altas, la extensión de los arcos está muy discretizada. Esto se debe a que en esas condiciones el sistema aparece muy ordenado, con una estructura formada por grupos de granos ordenados en forma casi de red separados entre sí por fronteras desordenadas y, por tanto, las distancias entre discos están dadas por valores cercanos a las distancias características de la red. Aunque al aumentar la intensidad de batido la densidad disminuye, esta permanece en valores relativamente altos (debido a que los discos son monodispersos), por esta razón la extensión de los arcos a intensidad de batido alta sigue presentando picos característicos. El modelo teórico basado en un paseo aleatorio no da lugar a estas distribuciones discretizadas. Debe tenerse en cuenta, no obstante, que el modelo fue propuesto para describir los arcos que se forman a la salida de una tolva, donde las partículas no están ordenadas.

4.5 Arcos en configuraciones estáticas.

En un experimento puede ser muy difícil seguir la historia del proceso de sedimentación del lecho granular y lo más probable es que se disponga únicamente de la configuración final, en la que sí es posible identificar los contactos. En esta sección se prueban dos criterios para identificar contactos de soporte, de entre todos los contactos de un grano, para ver si las distribuciones de arcos así obtenidas son similares a las que se observan al seguir todo el proceso de sedimentación.

Primero, se identifican todos los contactos que pueden estabilizar a un grano dado, teniendo en cuenta sus posiciones relativas y el criterio del segmento de contacto. De estos contactos, el criterio *a)* toma dos al azar como contactos de soporte, mientras que el criterio *b)* toma el par con el centro de masas más bajo. En la figura Fig. 4.8 se muestran los resultados para las configuraciones obtenidas con $\Gamma = 0,71$ y $\Gamma = 4,99$. El criterio aleatorio identifica mejor los arcos que el criterio

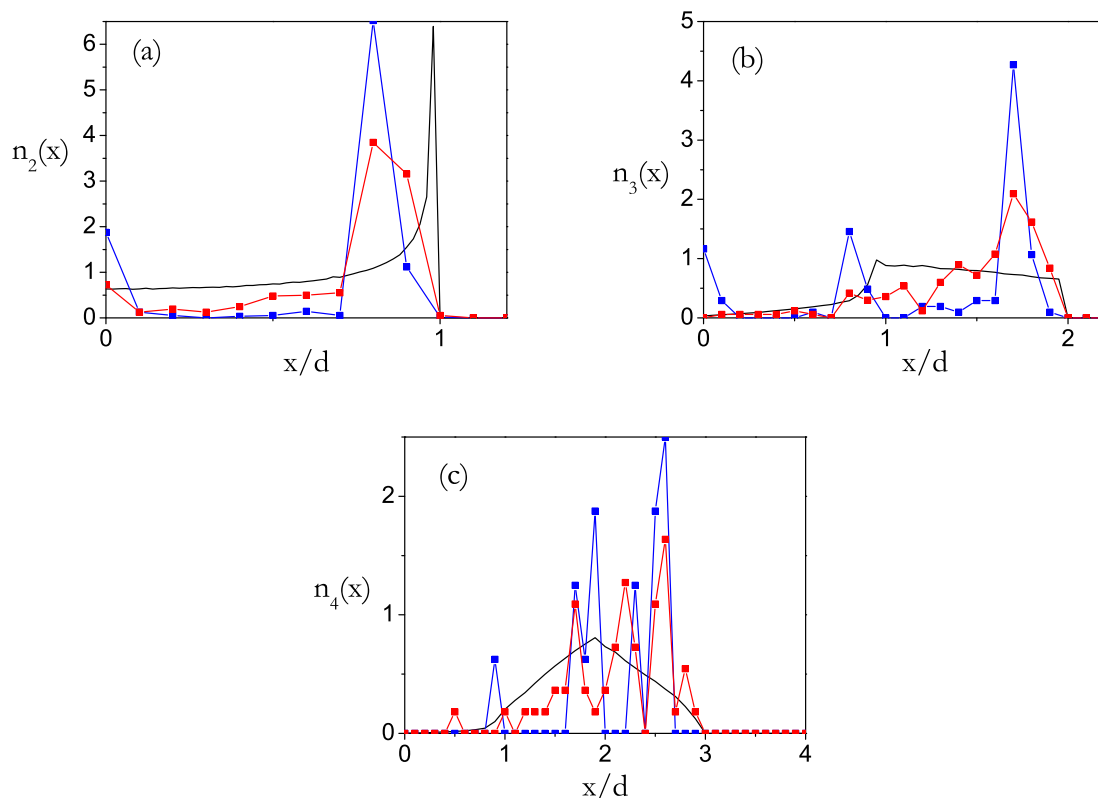


Figura 4.7: Extensión horizontal de los arcos formados por 2 (a), 3 (b) y 4 (c) discos. Las líneas rojas son los datos para $\Gamma = 4,99$, la azul para $\Gamma = 0,71$ y la negra es el modelo de teórico basado en un paseo aleatorio restringido [112].

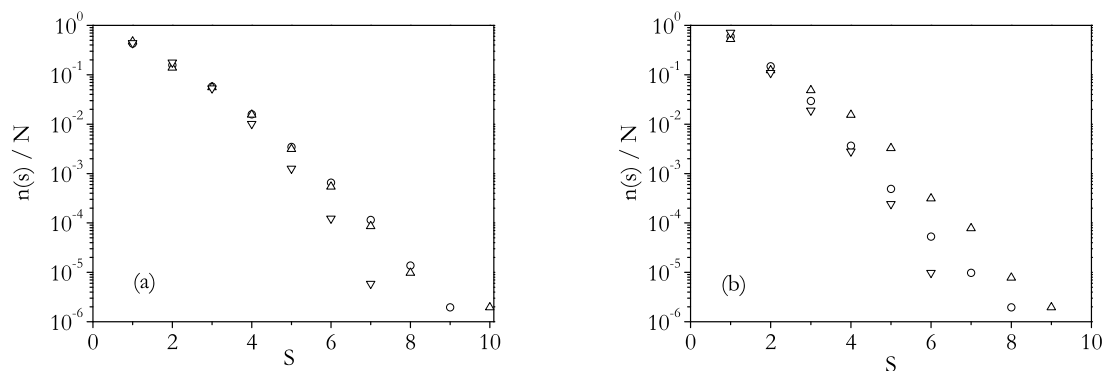


Figura 4.8: Distribución de tamaños de arcos para $\Gamma = 4,99$ (a) y $\Gamma = 0,71$ (b) comparando la distribución obtenida siguiendo la historia de la sedimentación (círculos) con la obtenida de la estructura final con el criterio *a*) (triángulos hacia arriba) y el *b*) (triángulos hacia abajo).

b) en el caso de lechos desordenados ($\Gamma = 4,99$). En lechos ordenados ambos criterios fallan, el criterio *a)* sobrestima y el *b)* subestima el número de arcos más allá de $n(s) = 2$. Un análisis más detallado muestra que el criterio *a)* tiende a identificar muchos falsos pares de contactos de soporte en lechos ordenados, llevando a la identificación de falsos arcos. El criterio *b)*, en cambio, pierde muchos verdaderos pares de contactos de soporte.

Capítulo 5

Redes de fuerzas en medios granulares.

Los arcos estudiados en el capítulo precedente no incorporaban ninguna información sobre las fuerzas presentes en los contactos, pues se construyeron sobre una definición puramente geométrica de estabilidad. Un estudio estructural adicional puede llevarse a cabo usando los métodos del campo de redes complejas. Para ello, debe definirse el grafo o red: el conjunto de nodos y las aristas que los unen entre sí. Las redes que se estudian en el presente trabajo se construyen definiendo como nodo todo aquél grano que tiene al menos un contacto. De esta manera, la información sobre las fuerzas está almacenada en las aristas. Es importante notar que, con la definición dada, el número de coordinación que se obtiene de la red se calcula sin contar las partículas carentes de contactos (*rattlers* en la literatura).

El modelo de contacto utilizado en este capítulo es el modelo lineal con fricción estática, dado por las expresiones Ec.(2.1) y Ec.(2.9). Los valores de los parámetros del modelo en dimensiones reducidas son $k_n = 10^5 mg/d$, $\gamma_n = 150 m\sqrt{g/d}$, $k_t = \frac{2}{7}k_n$ y $\gamma_t = 300 m\sqrt{g/d}$ con un paso de integración $\tau = 10^{-4} \sqrt{d/g}$.

5.1 Compresión isotrópica.

Como se discutió en el capítulo introductorio, un medio granular comprimido isotrópicamente presenta una transición desde un estado diluido a uno sólido, en el que el sistema es rígido. Este fenómeno puede ser descrito teóricamente como una transición crítica [63] que está en buen acuerdo con recientes estudios experimentales [62] y numéricos [41, 64, 65]. El estado final del sistema se caracteriza por el desarrollo de un máximo en la función distribución de fuerzas de contacto. El carácter crítico de la transición se puede caracterizar mediante el exceso de número de coordinación. Así, el valor del número de coordinación respecto a su valor en la transición, $Z - Z_c$, se comporta como un parámetro de orden, siendo cero antes de la transición y creciendo según una ley de potencias después.

Los empaquetamientos analizados en el presente trabajo se obtienen comprimiendo isotrópicamente un conjunto de granos que inicialmente están situados al azar de manera que no hay ningún contacto. El sistema se comprime mediante cuatro paredes móviles (formadas por granos) hasta que la deformación máxima en el sistema alcanza un valor prefijado. La compresión se implementa aplicando a las paredes una fuerza externa F_p que aumenta en $0,015 mg$ cada 10^3 pasos de integración, de modo que la fuerza total sobre las paredes es F_p más la ejercida por los granos del sistema. Es esta fuerza total la que determina el desplazamiento de la pared a través

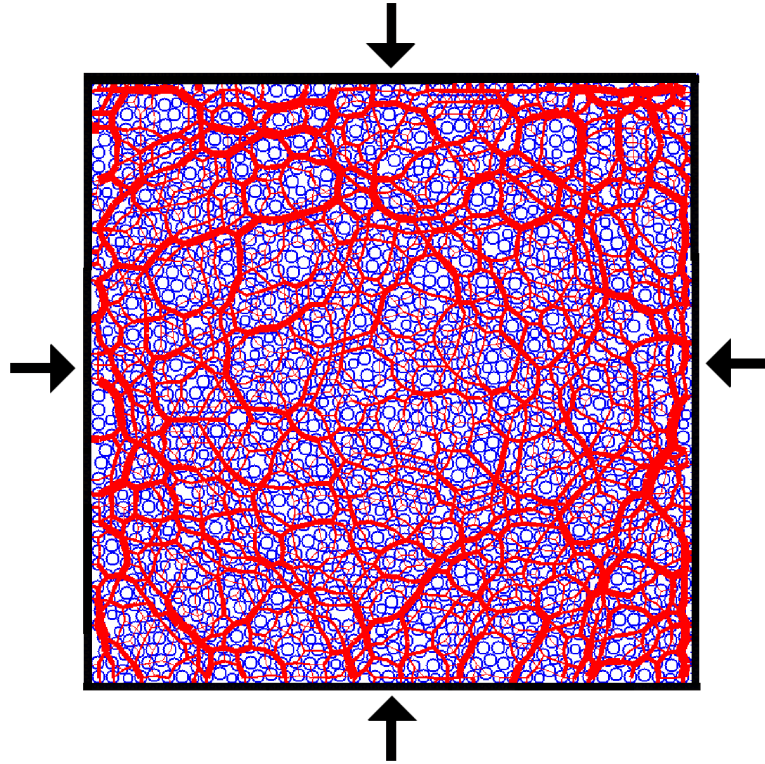


Figura 5.1: Celda de compresión mostrando cadenas de fuerzas. Entre cada par de granos en contacto se ha dibujado un segmento que une sus centros y cuya anchura es proporcional a la fuerza normal en el contacto.

de las ecuaciones de movimiento. Una celda comprimida mediante este protocolo puede verse en la figura Fig. 5.1, donde la densidad es aproximadamente $\phi \simeq 0,84$.

A continuación se muestra cómo el protocolo descrito da lugar a una transición de carácter crítico desde un sistema diluido a uno rígido, resultado que está de acuerdo con los resultados experimentales y computacionales conocidos. En la figura Fig. 5.2 se representa la distribución de fuerzas de contacto para varios valores de la densidad. A densidades bajas, la distribución es una función monótonamente decreciente. A medida que la densidad del sistema se incrementa se desarrolla una meseta en las fuerzas pequeñas ($\phi \simeq 0,83$) y para densidades aún mayores ($\phi \simeq 0,84$), la distribución presenta un máximo para una fuerza ligeramente por debajo de la media. La forma de la distribución es prácticamente invariable para densidades mayores que $\phi = 0,84$.

La presión en el sistema y la deformación de los granos aumentan ambas de forma aproximadamente lineal en función de la densidad, por encima de la densidad crítica en que se produce la transición, como puede verse en la Fig. 5.3. Puede comprobarse que el mismo comportamiento se observa en los resultados obtenidos por [62]. El punto de corte de un ajuste lineal a la presión en función de la densidad, promediado, es $\phi_c = 0,835 \pm 0,004$. Este valor es ligeramente menor al obtenido por Majmudar *et al.* $\phi_c = 0,8422$ que utilizan discos sin fricción (también en su modelo computacional) por lo que la diferencia se puede atribuir a la presencia de fricción en el modelo de contacto utilizado en el presente trabajo. La diferencia de densidades críticas entre modelos con y sin fricción es también muy pequeña en tres dimensiones, obteniéndose $\phi_c = 0,634$ y $\phi_c = 0,6284$ respectivamente, en estudios computacionales [47].

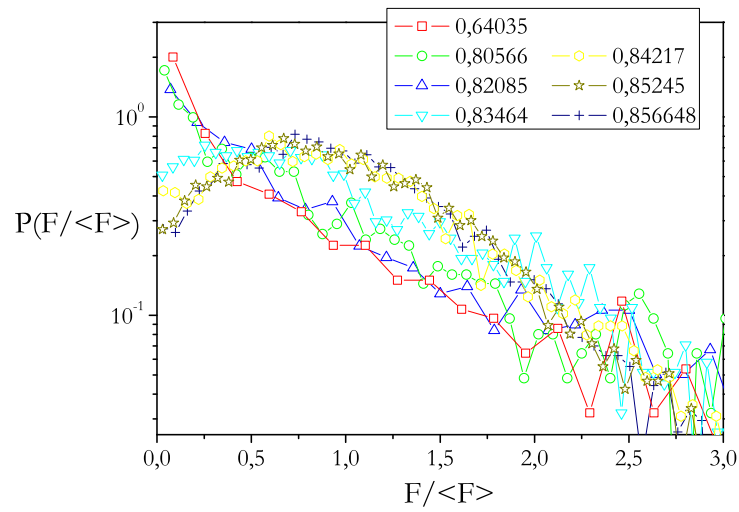


Figura 5.2: Función de distribución de las fuerzas de contacto para distintas densidades, mostrando cómo se desarrolla un máximo en torno a la fuerza media a medida que el sistema pasa de un estado fluido a uno rígido.

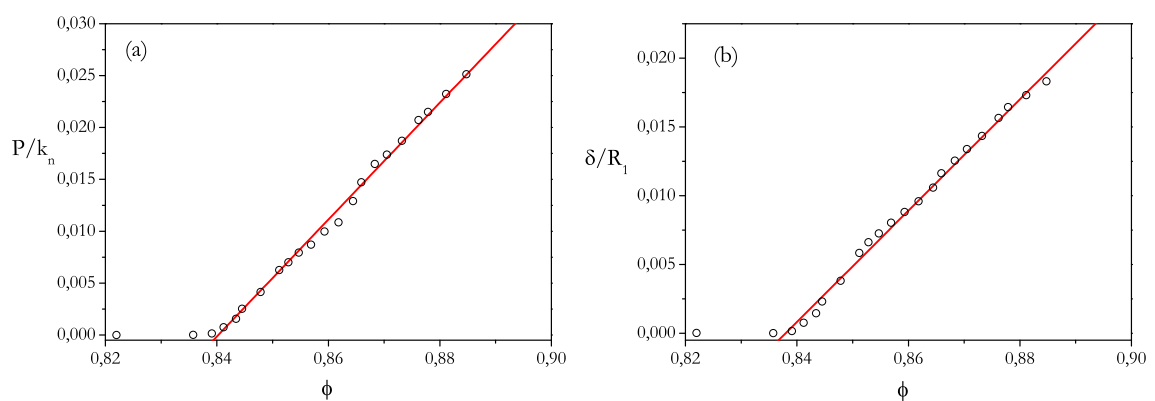


Figura 5.3: Izquierda: Presión en función de la fracción de compactación del sistema. Derecha: deformación media de los discos, con $R_1 = d/2$.

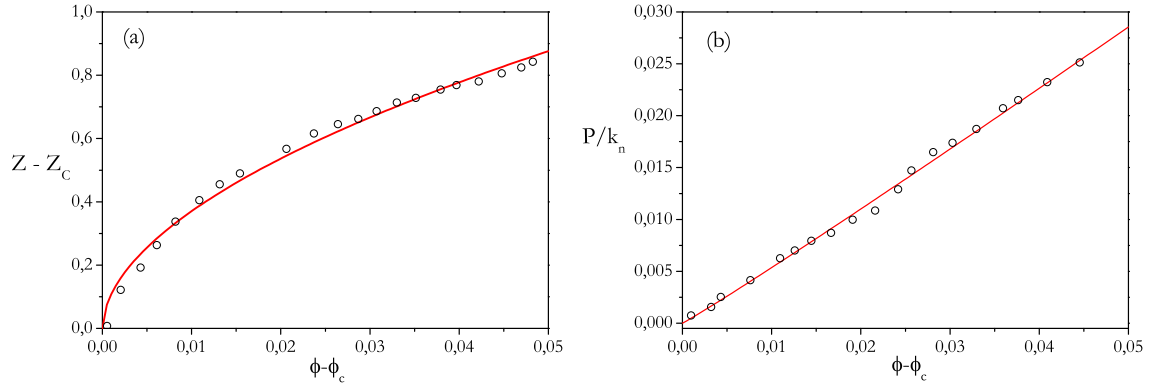


Figura 5.4: Izquierda: $Z - Z_c$ en función de la distancia a la densidad crítica $\phi - \phi_c$. La curva es un ajuste a $Z - Z_c \propto (\phi - \phi_c)^\nu$ con $\nu = 0,54$. Derecha: presión en función de la distancia a la densidad crítica $P \propto (\phi - \phi_c)^\psi$ con $\psi = 1,04$.

El parámetro que se utiliza en la literatura para seguir la evolución del sistema es la densidad respecto del valor crítico en la transición $\phi - \phi_c$. En la figura Fig. 5.4 puede comprobarse el comportamiento crítico del exceso de número de coordinación, una función de $\phi - \phi_c$ de la forma $Z - Z_c \propto (\phi - \phi_c)^\nu$ con $\nu = 0,54$. La presión presenta un comportamiento aproximadamente lineal, ajustándose a una expresión de la forma $P \propto (\phi - \phi_c)^\psi$ donde $\psi = 1,04$. Los valores de los exponentes obtenidos están en muy buen acuerdo con los de Majmudar *et al.* que obtienen 0,56 y 1,1 para los exponentes del número de coordinación y la presión, respectivamente. El número de coordinación crítico es $Z_c = 3,83$, similar al obtenido en el estudio computacional de [62] $Z_c = 3,89$. Los resultados obtenidos, con un error de ajuste en torno al 1 %, son compatibles, por tanto, con los encontrados experimentalmente y otros estudios computacionales [64].

5.2 Propiedades de la red de fuerzas.

En esta sección se analizará la red de fuerzas del medio granular en un justo por encima del umbral de la transición. En todos los casos se comprueba que la distribución de fuerzas posee el máximo característico en torno a la fuerza media, estando la densidad promedio en torno a $\phi = 0,84$.

Para analizar la influencia de diversas variables en las propiedades topológicas de la red de fuerzas se lleva a cabo el protocolo de compresión sobre varias muestras en las que se cambia el número de granos, la dispersión de tamaños de los discos, el coeficiente de fricción μ y la geometría de la celda. Los distintos valores utilizados se resumen en la tabla 5.1.

Tabla 5.1: Propiedades de las muestras comprimidas.

Muestra	Dispersión de tamaños	Coefficiente de fricción μ	Geometría de la celda
Muestra A	Bidispersa	0,5	Cuadrada
Muestra B	Monodispersa	0,5	Cuadrada
Muestra C	Bidispersa	0,25	Cuadrada
Muestra D	Bidispersa	0,5	Circular

En las muestras bidispersas hay un 15% de granos con radio $R_1 = d/2$ y el resto con $R_2 = 7/9R_1$. Para las muestras *A* y *B* se hicieron cálculos con sistemas de 512, 1024 y 2048 granos, para las muestras *C* y *D* sólo se usaron 2048 puesto que, como se verá, no hay una dependencia significativa de los resultados respecto al tamaño del sistema. Para cada muestra se hicieron 20 realizaciones independientes del protocolo y se promediaron los resultados. Los promedios sobre las realizaciones se designan mediante caracteres en negrita, mientras que un promedio en una realización se indica por $\langle \dots \rangle$.

Las propiedades estudiadas se analizan en función del parámetro $f = F_u / \langle F \rangle$, que define un umbral de fuerza. Se considerarán aristas de la red todos aquellos contactos en los que haya presente una fuerza superior a F_u . Así, cuando $f = 0$ se obtiene una red que está formada por todos los granos con, al menos, un contacto por débil que sea, y será referida como la *red contactos*. Al incrementar f , el número de aristas (y de nodos) decrece y se obtienen lo que en adelante se denominarán *grafos diluidos*.

5.2.1 Conectividad.

La conectividad k representa el número medio de contactos de un grano con sus vecinos. En la figura Fig. 5.5 se muestra la distribución de conectividades $P(k)$ de la red de contactos ($f = 0$). Debido a que un grano sólo puede *conectarse* a los que son sus vecinos geográficos, el recorrido de k es muy pequeño y no es posible decir si la red es aleatoria. La principal característica de la distribución es el marcado máximo en $k = 3$, con muy pocos granos en los extremos: aproximadamente el 95% de los granos tiene un k entre 2 y 4. El grado medio es ligeramente superior a 3, valor compatible con el límite isostático en medios granulares con fricción. También se ha verificado, Fig. 5.5a, que no hay una dependencia significativa de los resultados en función del número de partículas del sistema. En la figura Fig. 5.5b todas las distribuciones son prácticamente iguales y sólo difiere la correspondiente a la muestra *C*, que tienen valores ligeramente inferiores en $k = 2$ y superiores en $k = 4$. Esto se comprende al recordar que esta muestra tiene un coeficiente de fricción inferior al resto, por lo que los granos tienen más facilidad para empaquetarse y se incrementa el número de contactos; desapareciendo estructuras lineales ($k = 2$) y formándose más estructuras poligonales.

En la siguiente gráfica, Fig. 5.6, puede verse cómo varía la conectividad media en función de f . Al aumentar el valor de f , con lo que se eliminan las fuerzas pequeñas, la red se desagrega rápidamente. La curva presenta un punto de inflexión en torno a $f / \langle F \rangle = 1$, que corresponde a una conectividad media de $\langle k \rangle \simeq 2$. Estos resultados no dependen del tamaño del sistema, Fig. 5.6a, ni de los otros factores analizados, ver figura Fig. 5.6b. Hay una ligera variación numérica en la muestra *C* pero el comportamiento es esencialmente el mismo en todos los casos.

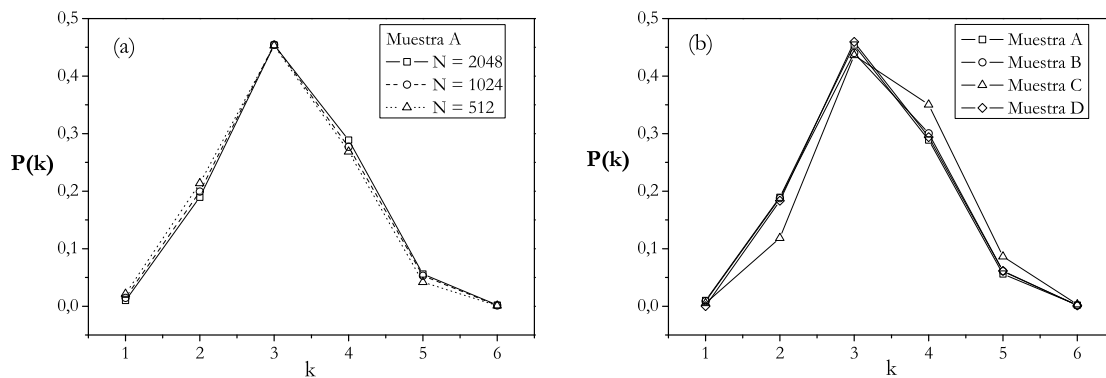


Figura 5.5: Distribución de conectividades (a) en la muestra A para diversos tamaños y (b) en las diferentes muestras para $N = 2048$. No se aprecian diferencias significativas entre los resultados.

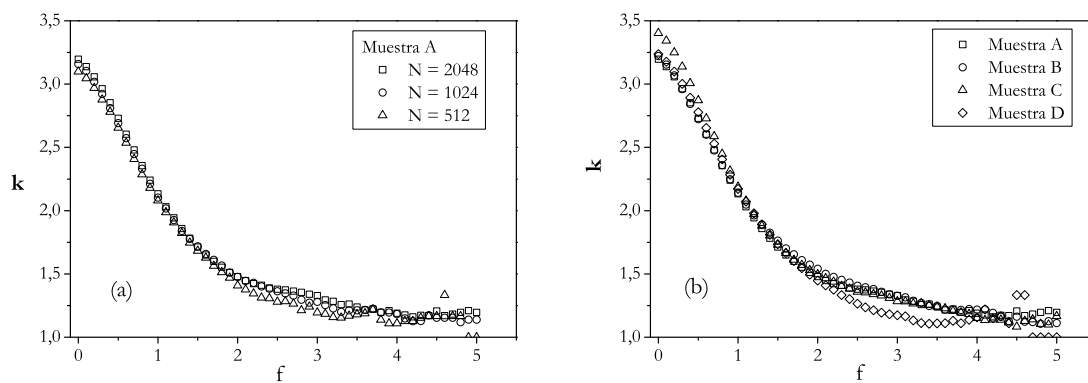


Figura 5.6: Conectividad media en función de f para (a) diferentes tamaños de la muestra A y (b) todas las muestras con $N = 2048$. En todos los casos se observa un punto de inflexión en torno a $f = 1$ que corresponde a $k \simeq 2$.

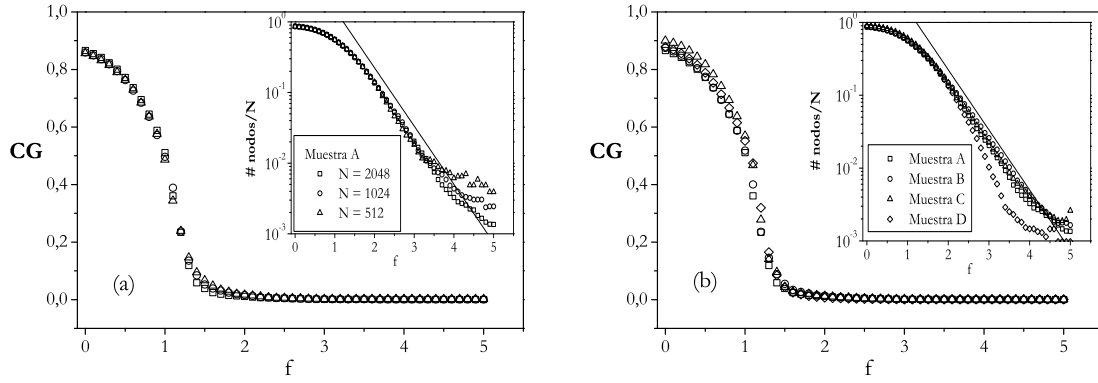


Figura 5.7: Tamaño en número de granos del componente gigante, normalizado por N , y número de granos, normalizado por N , en función de f . En (a) los resultados para los diversos tamaños de la muestra A y en (b) los de todas las muestras con $N = 2048$. La línea en la gráfica del número de nodos es una exponencial. En todos los casos los cambios más acusados ocurren en la vecindad de $f = 1$.

5.2.2 Número de nodos y tamaño del componente gigante.

Incrementar el valor de f supone desagregar la red, de modo que se obtienen grupos en los que los nodos se conectan entre sí pero no con los miembros de otros grupos. El tamaño del mayor de estos grupos (o componente gigante) se representa en la figura Fig. 5.7, medido en número de granos y normalizado por el número total de granos N de la muestra. Se constata que la mayor variación en el tamaño del componente gigante tiene lugar entre $f / \langle F \rangle = 0,5$ y $f / \langle F \rangle = 1,5$, con el punto de inflexión en torno a la fuerza media. Este resultado indica que el tamaño del componente gigante sólo se ve afectado por las fuerzas próximas a la media y no por las muy pequeñas.

Es interesante calcular en qué punto se produce la percolación del componente gigante. Puesto que el sistema está sometido a una compresión isotrópica, se considera que el componente gigante percola cuando, por primera vez, toca a las cuatro paredes de la celda a medida que se reduce el valor de f desde su valor máximo, y se añaden, por tanto, enlaces a la red. En media, este punto está en $f = 1,16$ con una desviación estándar de $0,3$.

El decaimiento en el número de nodos de la red es exponencial en f para fuerzas superiores a la media, como puede verse en la figura Fig. 5.7. Eliminar las fuerzas muy pequeñas introduce una variación suave del número de constituyentes de la red, y sólo al eliminar las fuerzas cercanas a la media se obtiene una variación significativa. Los resultados obtenidos son, de nuevo, independientes tanto del tamaño del sistema como de la polidispersidad de los discos, la fricción o la geometría de la celda.

5.2.3 Distancia geodésica media y diámetro de la red.

Se define la distancia geodésica l entre dos nodos como la longitud (en número de nodos) del camino más corto que lleva de uno a otro, la distancia geodésica media es el promedio entre todos los nodos. El diámetro D de la red es la mayor de las distancias geodésicas. En la figura Fig. 5.8 se representa l normalizada por $\sqrt{N}/2$ y D normalizado por $\sqrt{2N}$. Se aprecia que ambas magnitudes presentan un máximo en un valor ligeramente superior a la fuerza media. Este comportamiento puede ser comprendido en términos de los polígonos presentes en la red, como se mostrará más

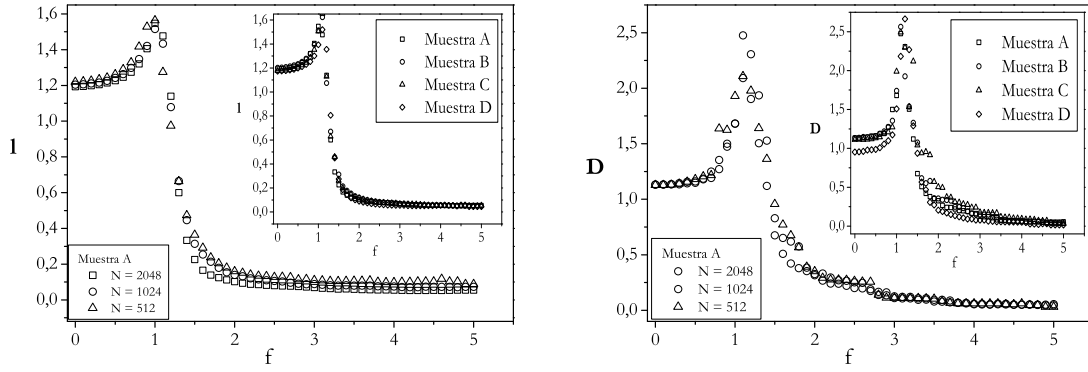


Figura 5.8: A la izquierda, la distancia geodésica normalizada por $\sqrt{N}/2$ y a la derecha el diámetro de la red normalizado por $\sqrt{2N}$. Todos los casos muestran un pico muy marcado en torno a $f = 1$.

adelante.

Los resultados obtenidos no dependen ni del tamaño del sistema ni de las propiedades de los granos. La celda circular, muestra *C*, presenta una ligera desviación cerca del origen debido a que la normalización $\sqrt{2N}$ es apropiada para celdas cuadradas.

5.2.4 Propiedades de los grupos.

En esta sección se analizan las propiedades de los grupos de nodos conectados entre sí y aislados de otros grupos que aparecen al desagregarse la red. Siguiendo los métodos de teoría de percolación, se elimina el componente gigante y se analizan los grupos restantes. En la figura Fig. 5.9 se representa la distribución de tamaños de estos grupos. En escala logarítmica, estas distribuciones pueden ajustarse mediante rectas, lo que implica que siguen un comportamiento aproximado de ley de potencias $n(s) = s^{-\alpha}$ en el rango de valores accesible con los actuales resultados. Las distribuciones en torno a la fuerza media decaen muy rápido debido a que el componente gigante aglutina aún a la mayor parte de los nodos de la red, y los grupos aislados contienen, necesariamente muy pocos nodos.

En la figura Fig. 5.10 se muestra el tamaño medio $\langle s \rangle$ de los grupos o componentes aislados. El tamaño medio presenta un máximo para un valor ligeramente por encima de la media y decae a ambos lados. Para fuerzas menores que la media, el decaimiento se debe a que los nodos los aglutina el componente gigante, mientras que para fuerzas mayores se debe a que la eliminación de aristas conlleva la eliminación de cada vez más nodos. Este comportamiento de los nodos provoca que el exponente α sea una función de f , como se ve en la figura Fig. 5.10. Para fuerzas menores que la media, casi todos los nodos están en el componente gigante y muy pocos en los grupos aislados y, por tanto, $n(s)$ decae rápidamente y alcanza valores pequeños. A medida que se incrementa f , el componente gigante se reduce y los nodos se van a los grupos aislados, que aumentan de tamaño, y esto se refleja en que $n(s)$ decae más despacio. Nótese que el mínimo en α y el máximo en $\langle s \rangle$ están en torno al mismo valor de f . Al seguir incrementando f se eliminan muchas aristas y nodos, por lo que, de nuevo, los grupos ven reducidos sus tamaños y $n(s)$ vuelve a decaer rápidamente.

El segundo momento de la distribución de tamaños m_2 fue analizado por Ostojic *et al.* [84] aplicando el método de dinámica molecular de partículas blandas a un proceso de compresión en dos dimensiones. Estos autores demuestran que existe una curva universal cuando se representa

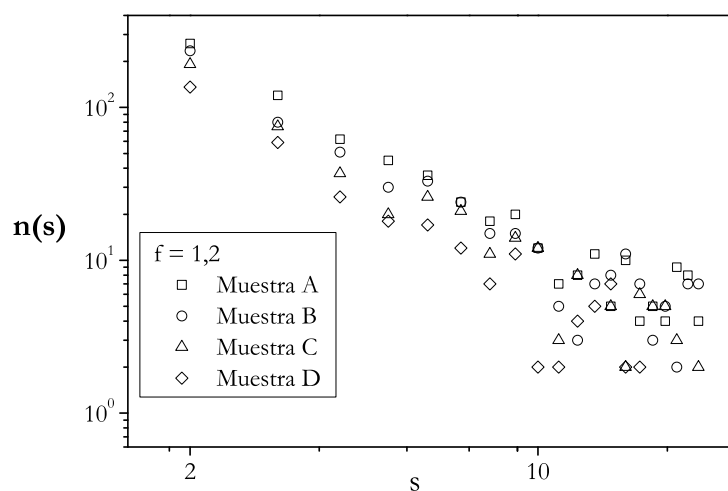


Figura 5.9: Distribución de tamaños de los grupos aislados (eliminando el componente gigante) para todas las muestras con $N = 2048$ y $f = 1,2$.

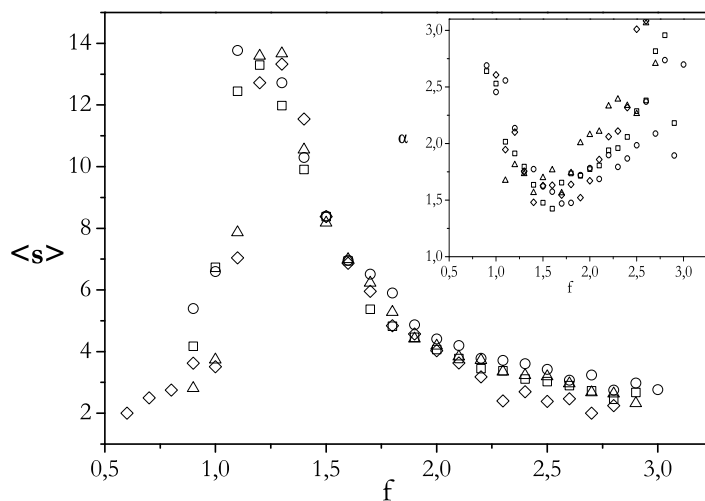


Figura 5.10: Tamaño medio en número de granos de los grupos aislados junto con el exponente α obtenido al ajustar $n(s) = s^\alpha$. Los significados de los símbolos son como en las gráficas previas. Se usan sólo las muestras con $N = 2048$.

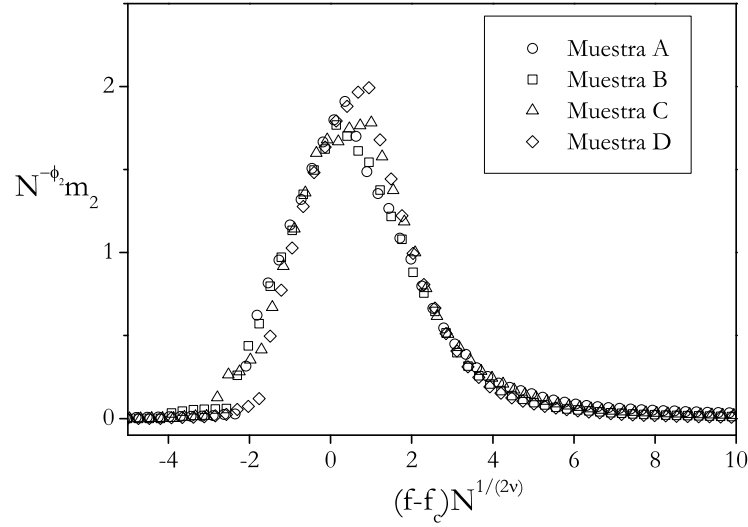


Figura 5.11: Segundo momento de la distribución de tamaños aplicando la escala propuesta en [84]. Las curvas de las distintas muestras colapsan en una sola curva para $\phi_2 = 0,86$ y $\nu = 1,59$ con $N = 2048$.

$N^{-\phi_2} m_2$ frente a $(f - f_c) N^{1/2\nu}$, donde N es el número de partículas y f tiene el mismo significado que en el presente trabajo. Los exponentes ϕ_2 y ν son los exponentes críticos que hacen colapsar las curvas obtenidas variando la polidispersidad, fricción o número de partículas. El valor de f_c cambia de una muestra a otra, con valores ligeramente por encima de la fuerza media. En la figura Fig. 5.11 se muestran las curvas del segundo momento de la distribución de tamaños correspondientes a las cinco muestras con 2048 granos, donde se ha usado una media móvil para reducir el ruido debido a la poca estadística (en [84] se usan muestras de 10000 granos). Los valores obtenidos para los exponentes son $\phi_2 = 0,86$ y $\nu = 1,59$ en muy buen acuerdo con los de Ostojic *et al.* $\phi_2 = 0,89$ y $\nu = 1,6$.

5.2.5 Dimensión fractal.

En la teoría de fenómenos críticos el valor de la dimensión fractal determina la universalidad de un sistema y, por tanto, un conjunto de propiedades. En esta sección se calcula la dimensión fractal en función de f . Se utilizarán dos definiciones de la dimensión fractal [113]: la dimensión fractal de masa y la de *box-counting*. La primera se calcula eligiendo un nodo y trazando circunferencias de radio R a su alrededor. Se calcula la masa M , en número de nodos, y si se comporta como $M \propto R^{d_M}$ entonces d_M es la dimensión fractal de masa. El procedimiento se repite cambiando el nodo inicial y promediando los resultados. La dimensión fractal de *box-counting* se calcula analizando cómo varía el mínimo número de cajas N_B necesarias para cubrir la red en función del tamaño L de la caja. Si se verifica $N_B \propto L^{d_B}$, d_B es la dimensión fractal. El último método es el más complicado, debido al proceso de minimización, y para implementarlo se siguieron los métodos expuestos en [114].

Los resultados aplicados a las muestras de 2048 partículas se muestran en la figura Fig. 5.12. Ambas dimensiones fractales son similares entre sí y con pocas diferencias de una muestra a otra. Para fuerzas menores que la media, el valor de la dimensión fractal es compatible con una constante aproximadamente igual a 1,8. Este resultado es consistente con el colapso a una curva

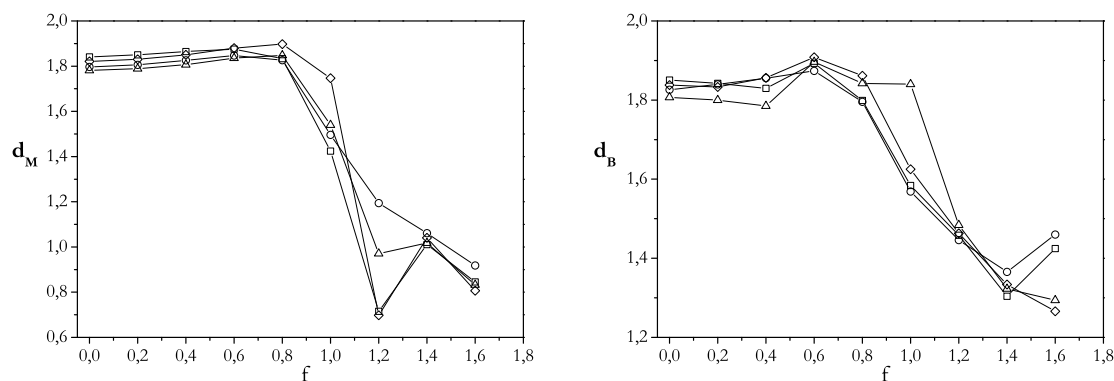


Figura 5.12: Dimensión fractal de masa (izquierda) y de *box-counting* (derecha) obtenidas con las muestras con 2048 granos. El significado de los símbolos es el mismo que en las gráficas anteriores.

universal, pues entre el exponente ϕ_2 y la dimensión fractal d_f se da la relación $\phi_2 = d_f - 1$ [84], por lo que partiendo del valor de ϕ_2 obtenido antes, se tiene para la dimensión fractal $d_f = 1,86$, muy similar al obtenido en esta sección. En torno a la fuerza media, la dimensión fractal cae abruptamente hasta valores en torno a la unidad la de masa, y ligeramente por encima de la unidad la de *box-counting*. Más allá no es posible hacer cálculos debido a que la red está muy disgregada.

Como el resto de propiedades analizadas, la dimensión fractal experimenta un cambio brusco cuando se eliminan las fuerzas menores que la media. Esto sugiere que la red de contactos ($f = 0$) y las redes diluidas con $f = 1$, o mayor, pertenecen a clases de universalidad diferentes, siendo la fuerza media la magnitud física correspondiente que separa ambos comportamientos.

5.2.6 Polígonos.

Se denomina polígonos de la red a los circuitos cerrados formados por 3, 4, 5... aristas, es decir, configuraciones triangulares, cuadradas y demás en que aparecen las aristas. Estas estructuras encierran volúmenes, tanto mayores cuanto mayor número de lados tiene el polígono, y tienen relación, por tanto, con propiedades físicas del medio granular como la fracción de compactación y el número de arcos. En la figura Fig. 5.13 se muestra el número de polígonos de las redes analizadas en función de f y en la figura Fig. 5.13f la función de distribución de cada tipo de polígono. El comportamiento del número de polígonos en función de f es muy similar en todas las redes: decae bruscamente en torno a la fuerza media, de modo que más allá de ella apenas hay polígonos en la red. En todos los casos el decaimiento del número de polígonos es exponencial en la cola con una región en las fuerzas pequeñas que tiende a aplanarse y extenderse cuanto más grandes son los polígonos considerados. Esto es debido a que polígonos grandes, heptágonos o hexágonos, son raros, por lo que al comenzar a eliminar aristas (al incrementar f) la probabilidad de que se vean afectados será mucho más baja que la de que se vea afectado un cuadrado o triángulo, mucho más numerosos. Así mismo, para polígonos pequeños, se constata que la muestra con menor fricción C , es más rica en estas estructuras cerradas. Esto se debe a que la menor fricción permite un mayor acomodamiento de los granos, que se empaquetan más densamente.

El número relativo de cada tipo de circuito cerrado puede verse en la figura Fig. 5.13f. Los más abundantes son los cuadrados, triángulos y pentágonos, siendo los más grandes, hexágonos y heptágonos, menos frecuentes. El número de polígonos pequeños es mucho mayor en la muestra

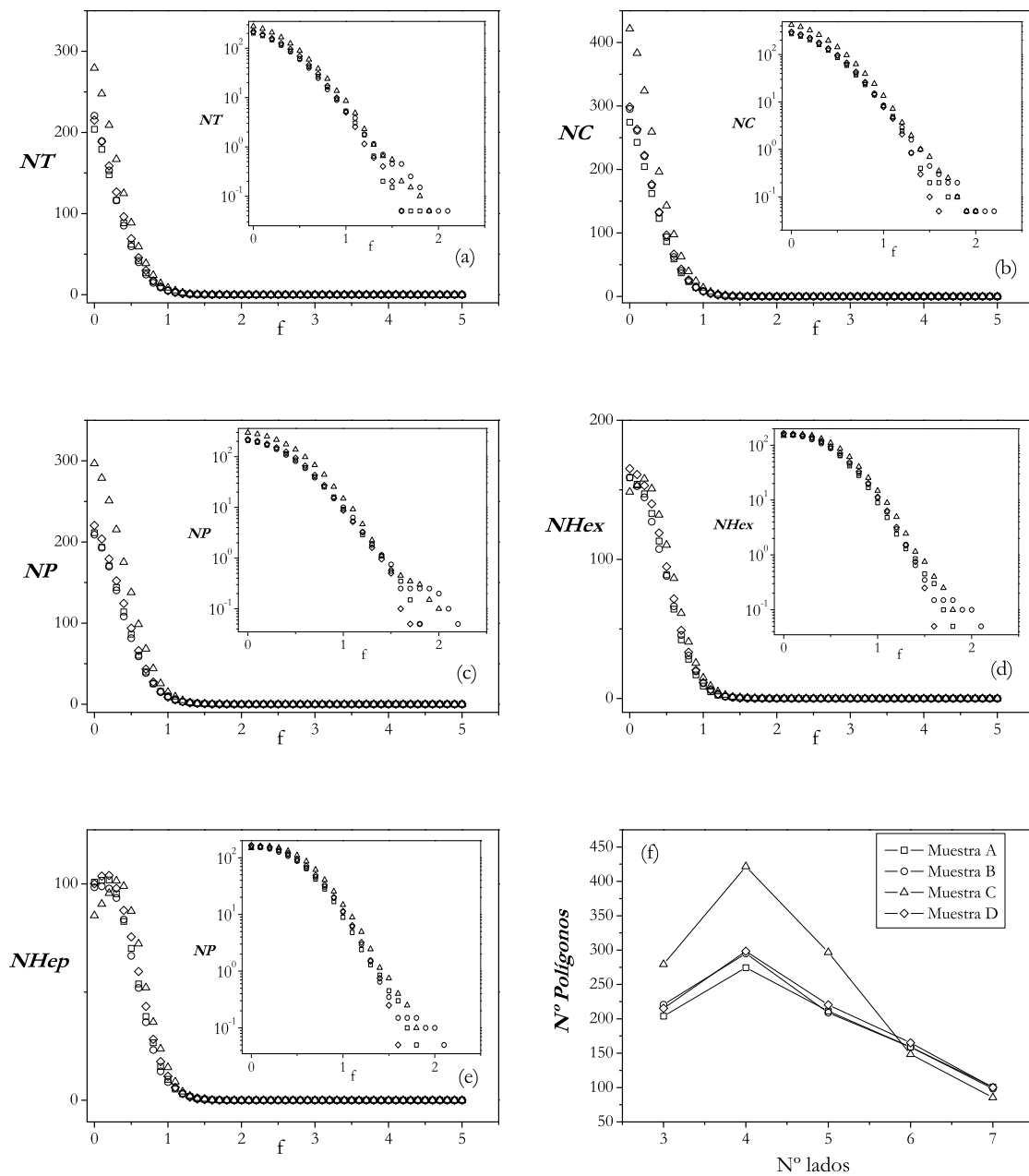


Figura 5.13: Número de polígonos en las redes analizadas. En cada figura se muestra el número de polígonos en función de f en escala lineal y semilogarítmica: (a) triángulos, (b) cuadrados, (c) pentágonos, (d) hexágonos y (e) heptágonos. En la figura (f) se presenta la función de distribución de los polígonos. El significado de los símbolos es el mismo en todas las gráficas.

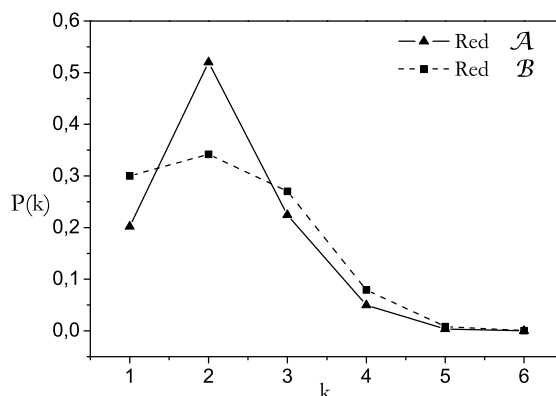


Figura 5.14: Distribución de contactos de ambas redes en $f = 1$. El pico en $k = 2$ de la red \mathcal{A} (fuerzas grandes) es mucho más agudo que el de la red \mathcal{B} , indicando una tendencia más acusada hacia la linealidad en su estructura.

de menor fricción, mientras que para los polígonos mayores se invierte el comportamiento y esta red los presenta en menor cantidad. Estos resultados son totalmente coherentes con lo discutido en el párrafo previo.

Los resultados sobre los triángulos permiten determinar el coeficiente de *clustering* o transitividad de la red. En todos los casos la red de contactos presenta una transitividad muy baja, entre 0,1 y 0,15, siendo este último valor el de la red con menor fricción. Valores bajos de la transitividad son característicos de las redes aleatorias, y es un indicador del tipo de modelo al que pertenece una red.

5.2.7 Subredes en la red de contactos.

Todas las propiedades topológicas analizadas en las secciones previas muestran un claro cambio de comportamiento en torno a la fuerza media. En este punto, las propiedades estructurales de la red de fuerzas cambian y tal cambio está restringido al rango de fuerzas que están muy cerca de la media, en torno al punto donde se produce la percolación. Se ha propuesto [115] que la red de contactos de un empaquetamiento granular puede considerarse compuesta de dos subredes, una red “débil” constituida por los enlaces que soportan una fuerza menor que la media, y una red “fuerte” formada por los que tienen una fuerza superior a la media. La primera estaría formada por un 60% de los granos y la última por un 40%.

Los resultados de las secciones previas son compatibles con la existencia de estas dos subredes y revelan algunas de sus propiedades. El análisis del tamaño del componente gigante junto con la distribución de tamaños de los grupos aislados, muestra la existencia de una red filamentosa, aproximadamente lineal, de fuerzas grandes que se expande por la celda de compresión, y pequeños grupos de nodos aislados conectados por fuerzas débiles. El análisis de los polígonos muestra que éstos se concentran en la red de fuerzas pequeñas. La diferente naturaleza de ambas redes puede confirmarse de manera adicional en las figuras Fig. 5.14 y Fig. 5.15. En Fig. 5.14 se muestra la distribución de conectividades de las redes obtenida para fuerzas por encima y por debajo de la media, \mathcal{A} y \mathcal{B} respectivamente. La estructura filamentosa de la red “fuerte” queda reforzada por el hecho de que el pico en $k = 2$ es mayor que para la red “débil”, que presenta, además, una probabilidad algo mayor en las conectividades altas.

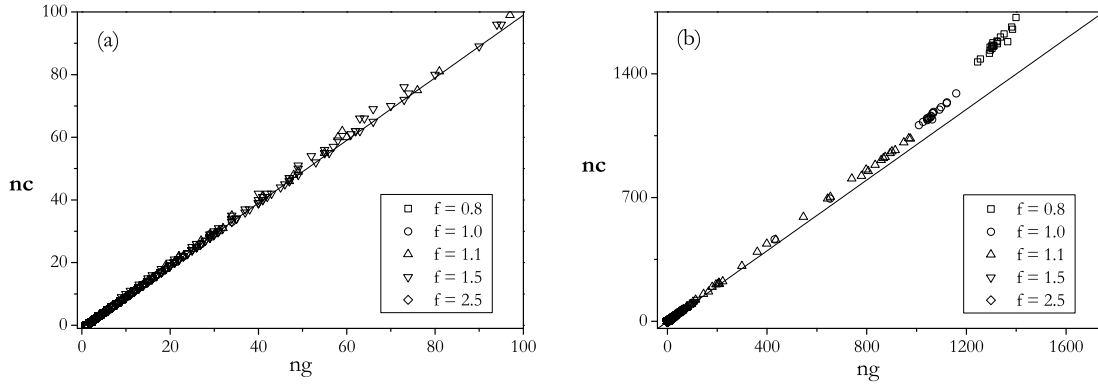


Figura 5.15: Número de contactos frente al número de granos. La red de fuerzas grandes, $f = 2,5$ y $f = 1,5$ sigue perfectamente la recta $ng - 1$ lo que demuestra su estructura lineal. Las redes con fuerzas pequeñas, en cambio, presentan un mayor número de contactos que el esperado en una estructura lineal.

Una cadena lineal de n granos tiene $n - 1$ contactos, mientras que si la cadena se pliega y adopta una configuración más poligonal, el número de contactos aumenta. La figura Fig. 5.15 muestra el número de contactos frente al número de granos para las redes obtenidas al eliminar las fuerzas menores que f veces la media, para varios valores de f . Para $f = 1,5$ y $f = 2,5$ se han eliminado de la red las fuerzas pequeñas y los puntos caen sobre la recta $nc = ng - 1$, ver Fig. 5.15a, demostrando que la red de fuerzas grandes es lineal. A medida que se toman valores más pequeños de f se incluyen en la red fuerzas pequeñas, y puede verse en la figura Fig. 5.15b cómo el número de contactos aumenta, demostrando que las fuerzas pequeñas no adoptan una configuración lineal, sino más compacta y conectada.

5.3 Transición al estado rígido.

En esta sección se analizarán las propiedades topológicas de la red de fuerzas en el sistema compactado, así como el comportamiento de estas propiedades en la evolución del sistema. Para ello, se dividirá la sección en dos subsecciones. En la primera de ellas se presentan los resultados de las redes de fuerzas obtenidas en sistemas muy por encima de la transición, con densidades $\phi \simeq 0,89$, para compararlos con los analizados en la sección previa donde la densidad del sistema era menor. La siguiente subsección analiza la evolución de algunas propiedades topológicas desde el estado de baja densidad hasta el estado final.

5.3.1 Topología de la red de fuerzas del sistema compactado.

La distribución de las conectividades muestra un cambio importante respecto a resultados previos, como puede verse en la figura Fig. 5.16a. A baja densidad, el máximo en la distribución de conectividades está en $k \simeq 3$, mientras que ahora aparece en torno a 5. Este resultado es de esperar, pues al incrementar la densidad del sistema y la deformación de los granos es lógico que se formen más enlaces, aumentando el número de coordinación. En la figura Fig. 5.16b se comprueba que la variación de la conectividad en función de f mantiene cualitativamente la misma forma que en resultados previos. La conectividad cae rápidamente a medida que se eliminan las

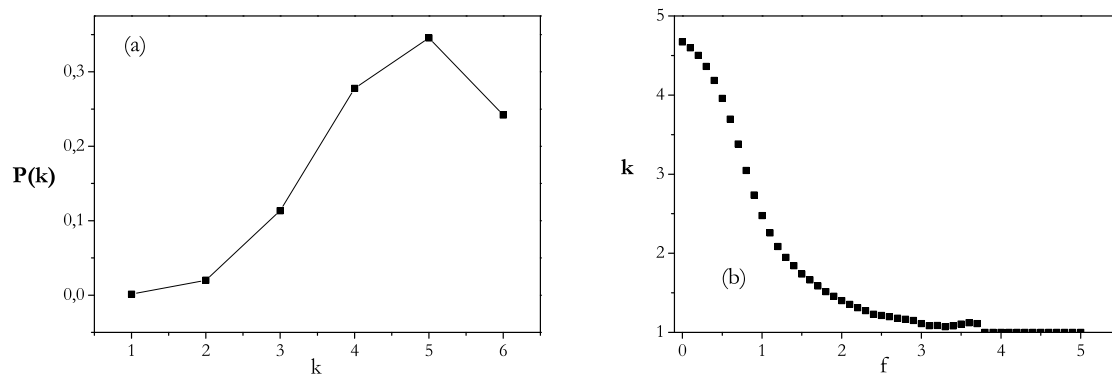


Figura 5.16: (a): distribución de conectividades en la red de contactos ($f = 0$). (b): conectividad media en función de f .

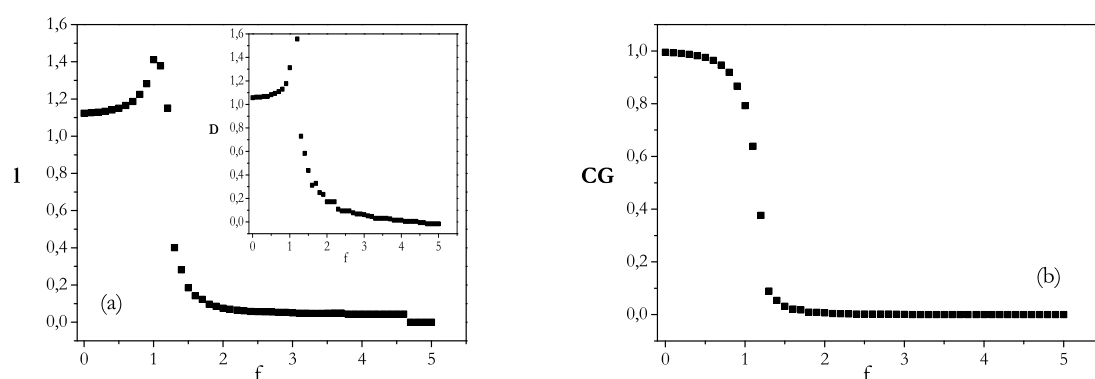


Figura 5.17: (a): distancia geodésica media junto al diámetro de la red normalizados por $\sqrt{N}/2$ y $\sqrt{2N}$ respectivamente. (b): tamaño del componente gigante normalizado por N .

fuerzas menores que la media y varía suavemente después. El punto de inflexión aparece algo por debajo de la fuerza media correspondiendo a una conectividad en torno a 3.

La distancia geodésica, ver figura Fig. 5.17a, presenta las mismas características que en las redes obtenidas a densidad más baja, con un pico muy marcado en torno a la fuerza media y una caída muy brusca a fuerzas mayores, de modo que poco por encima de la $f = 1$ la distancia geodésica se aproxima a cero. El tamaño del componente gigante, figura Fig. 5.17b también muestra el mismo comportamiento que en resultados previos, si bien su forma parece aproximarse más a una función escalón. En efecto, para fuerzas muy pequeñas se observa una meseta indicativa de que el componente gigante no se ve afectado al eliminar fuerzas próximas a cero. Muy cerca de la fuerza media, en cambio, el componente gigante disminuye de tamaño drásticamente y tiende a cero para fuerzas poco por encima de la media. El comportamiento es el mismo al observado previamente, con una meseta extendida en las fuerzas muy pequeñas debida a la mayor conectividad del sistema, que hace al componente gigante más robusto frente a la eliminación de dichas fuerzas.

La distribución de tamaños de los polígonos se muestra en la figura Fig. 5.18a donde se comprueba que ahora los triángulos son el polígono más numeroso en la red, con cantidades cada

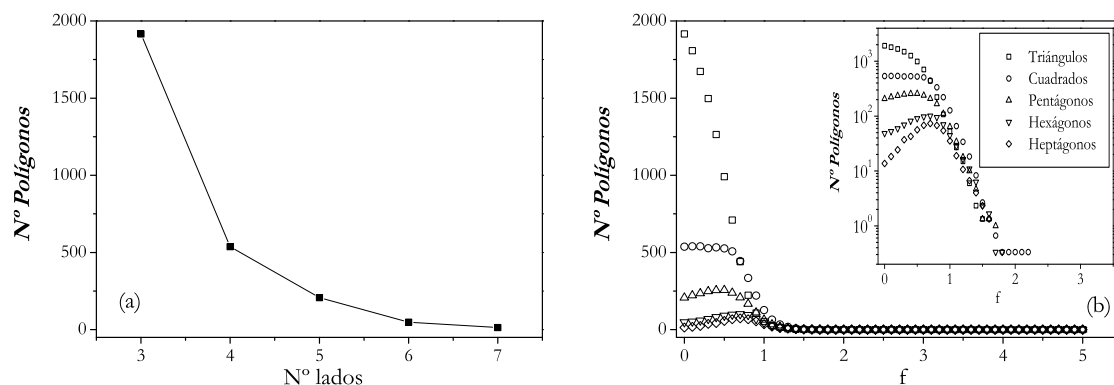


Figura 5.18: (a): distribución de los polígonos de la red de contactos. (b): número de polígonos de cada tipo, en escalas lineal y semilogarítmica, en función de f .

vez menores de cuadrados, pentágonos, hexágonos y heptágonos. Este resultado es de esperar, dada la alta densidad alcanzada por los estados analizados en esta sección el número de polígonos grandes, que encierran volúmenes grandes, debe necesariamente disminuir respecto a estados menos densos. Al comprimir los polígonos grandes se forman triángulos, por lo que su número aumenta considerablemente. En la figura Fig. 5.18b puede verse que el número de polígonos en función de f presenta una caída exponencial para las fuerzas mayores que la media, siendo su número ya prácticamente nulo en torno a $f = 2$. Los polígonos grandes, heptágonos y hexágonos, ven incrementado su número al eliminar fuerzas pequeñas de la red, debido a que este proceso crea, al principio, huecos que están rodeados por polígonos relativamente grandes. El número de triángulos disminuye siempre, puesto que no pueden rodear volúmenes grandes. Para fuerzas mayores que la media todos los polígonos muestran el mismo comportamiento e igual al observado a presiones más bajas: un decaimiento exponencial.

Puede concluirse, por tanto, que al incrementar la presión en el sistema se observan cambios en las propiedades de la red de fuerzas derivados del aumento de la densidad, como son una conectividad mayor o un cambio en el número relativo de polígonos. Se conserva, en cambio, la cualidad crítica de la fuerza media como valor en torno al que se producen, de forma brusca, los cambios de comportamiento de las propiedades topológicas como funciones del parámetro f . Tanto la distancia geodésica como el diámetro de la red presentan un pico en torno a este valor y tienden rápidamente a cero para fuerzas mayores. El tamaño del componente gigante presenta una forma más próxima a una función escalón, lo que restringe la variación de su tamaño a un entorno muy estrecho de la fuerza media. Por último, los cambios en el número relativo de polígonos presentes en la red no alteran el hecho de que la naturaleza poligonal de la misma sólo se mantiene para fuerzas pequeñas. Al eliminar fuerzas en torno -y superiores- a la media, el número de polígonos presentes decae exponencialmente rápido, como se había observado en las redes a densidades menores.

5.3.2 Evolución de la topología en la transición.

A continuación se analiza cómo evolucionan algunas propiedades de la red de fuerzas durante la transición al estado rígido. En la figura Fig. 5.19a se muestra la distribución de conectividades $P(k)$ para varias densidades. Antes de la transición la distribución muestra un máximo en $k = 2$, lo que implica que la estructura es predominantemente lineal. En torno a la densidad crítica

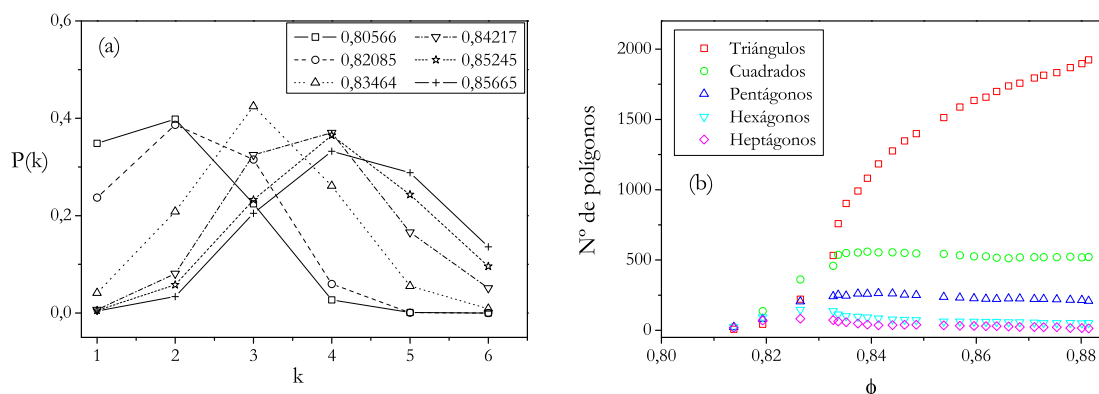


Figura 5.19: (a) Distribución de la conectividad de la red de contactos a medida que se incrementa la densidad en el sistema. Puede verse una transición de una estructura lineal con $k_{max} = 2$ antes de la transición en $\phi = 0,835$ a una estructura poligonal más conectada por encima del punto de transición. (b) número de polígonos de cada tipo en función de la densidad. Los triángulos son los únicos polígonos que aumentan en número.

$\phi = 0,835$ el máximo salta a $k = 3$ y se mueve a valores mayores de la conectividad a medida que aumenta la densidad, correspondiendo al desarrollo de una estructura poligonal muy conectada.

En la figura Fig. 5.19b se muestra la distribución de polígonos en función de la densidad. A densidades bajas hay muy pocos polígonos debido a que la estructura de la red de contactos es prácticamente lineal. En torno a la densidad crítica se produce un salto en el número de los polígonos debido al aumento de la conectividad. Sin embargo, el número de cuadrados y pentágonos permanece prácticamente constante al aumentar la densidad por encima del valor crítico; hexágonos y heptágonos decrecen en número debido a que se van llenando los volúmenes que rodean; y, finalmente, el número de triángulos es el único que aumenta después de la transición.

El tamaño del componente gigante para varias densidades se muestra en la Fig. 5.20a. Primero se analizará la forma de la función a densidades grandes. El tamaño del componente gigante varía lentamente a medida que se eliminan fuerzas pequeñas (incrementando f) y cae abruptamente cerca de $f = 1$, de modo que su valor es prácticamente nulo para $f \gtrsim 1,5$. Este comportamiento puede entenderse asumiendo que las fuerzas pequeñas pertenecen a la estructura poligonal. Efectivamente, eliminar enlaces que pertenecen a los polígonos no afecta al tamaño del componente gigante porque permanece conectado por el resto de enlaces. En torno a $f = 1$ la estructura poligonal casi ha desaparecido y, por tanto, la subsiguiente eliminación de enlaces causa la disminución del tamaño del componente gigante.

La distancia geodésica media para varias densidades del sistema puede verse en la figura Fig. 5.20b. Analizando los datos a densidades elevadas se encuentra, de nuevo, una abrupta variación en la vecindad de la fuerza media, de modo que la distancia geodésica media es casi nula a fuerzas mayores y muestra un meseta para fuerzas menores que la media. Este resultado puede interpretarse en términos de una estructura poligonal presente para valores pequeños de f . Si se lee la gráfica desde $f = 5$ hacia el origen es lógico que la distancia media aumente, puesto que se están añadiendo nuevos enlaces a la red. En torno a $f = 1$ la distancia media alcanza su valor máximo mostrando un pico agudo que da paso a una meseta de valores más pequeños en la región de las fuerzas pequeñas. La estructura poligonal que está presente para $f \lesssim 1$ proporciona atajos entre nodos ya conectados y, de ese modo, se reduce la distancia geodésica media.

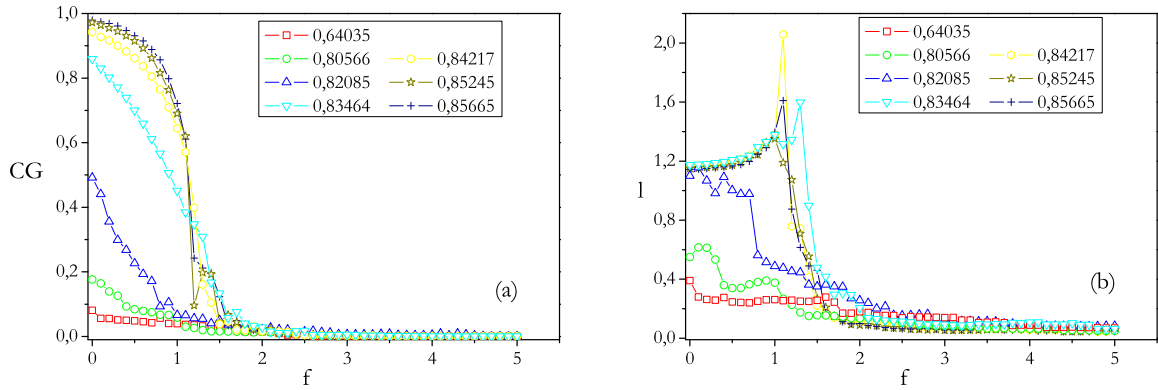


Figura 5.20: Evolución de la distancia geodésica (a) y el componente gigante (b) a medida que se incrementa la densidad del sistema. Cambios cualitativos en el comportamiento de ambas magnitudes son apreciables en torno al punto de transición: ambas funciones dejan de ser monótonas y se desarrolla un pico en la distancia geodésica, mientras que el componente gigante tiende a una función escalón.

Es interesante considerar cómo cambian la distancia geodésica y el tamaño del componente gigante al pasar de valores pequeños a valores altos de la densidad. En la figura Fig. 5.20 puede verse que, a bajas densidades, ambas propiedades son funciones decrecientes de f que se comportan suavemente, sin mostrar picos o variaciones abruptas en sus valores. A medida que se incrementa la densidad del sistema se añaden nodos y aristas a la red, que aumenta de tamaño, y, por tanto, la distancia media y el tamaño del componente gigante alcanzan valores mayores. En torno a la densidad crítica $\phi = 0,835$ la forma de ambas funciones cambia, mostrando ambas una abrupta caída cerca de $f = 1$ y variaciones pequeñas para valores menores de f . Cuando la densidad sobrepasa el valor crítico la red casi no crece debido a que ya se han añadido prácticamente todos los nodos; en cambio, se forman nuevas conexiones entre los nodos ocasionando la aparición de las variaciones bruscas en torno a la fuerza media. Esto corresponde al desarrollo de la estructura poligonal con elevada conectividad.

En este punto se puede establecer una analogía entre la red de fuerzas como función de f y la red de contactos como función de la densidad. Efectivamente, la red de fuerzas es predominantemente lineal en $f \simeq 1$ y desarrolla una estructura poligonal al añadir fuerzas pequeñas, mientras que la red de contactos es básicamente lineal en $\phi \simeq \phi_c$ y presenta una estructura poligonal para densidades mayores. Los resultados presentados deben entenderse tomando en cuenta ambas imágenes: antes de la transición no hay estructura poligonal para ningún valor de f dando lugar a funciones suaves, mientras que después de la transición, la estructura poligonal de las fuerzas pequeñas es responsable de la aparición de variaciones abruptas cuando f se incrementa por encima de $f \simeq 1$.

Al igual que ocurriría con la distribución de fuerzas, las propiedades topológicas discutidas presentan un claro cambio de comportamiento en la transición al estado rígido y pueden, por tanto, usarse como indicadores de la misma. Se ha argumentado cómo el desarrollo de una estructura poligonal es la responsable de estos cambios de comportamiento, y puesto que dicha estructura está dominada por los triángulos, su comportamiento se analiza a continuación. En la figura Fig. 5.21 se muestra el número de triángulos en función de la distancia a la densidad crítica. Como ocurre con el número de coordinación, el número de triángulos presenta un comportamiento

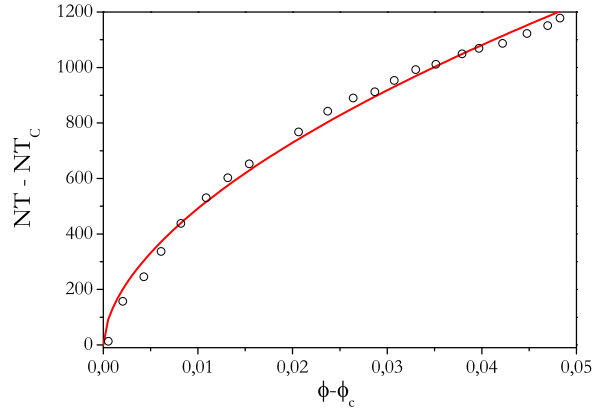


Figura 5.21: (a) número de triángulos menos el número de triángulos en el punto de transición en función de la distancia a la misma $\phi - \phi_c$. La curva es un ajuste a $NT - NT_c \propto (\phi - \phi_c)^\mu$ con $\mu = 0,54$.

crítico $NT - NT_c \propto (\phi - \phi_c)^\mu$ y el exponente es $\mu = 0,54$, el mismo que para Z . Este resultado muestra que el *exceso* de número de triángulos (número de triángulos respecto de su valor en la transición) es un parámetro de orden.

El número de triángulos se representa en función del número de coordinación en la figura Fig. 5.22. En escala logarítmica, se distinguen claramente dos regiones de crecimiento según una ley de potencias. La línea vertical señala la posición del número de coordinación crítico obtenido antes, Fig. 5.4 $Z_c = 3,83$, que coincide aproximadamente con la zona en que tiene lugar el cambio de pendiente en la figura Fig. 5.22. Para valores del número de coordinación menores que Z_c el número de triángulos varía como Z^6 , mientras que para valores mayores el número de triángulos es proporcional a Z^3 . Este último resultado es el que se obtiene al llenar de forma aleatoria los enlaces de una red [116], puede considerarse, por tanto, que en la región por encima de la transición la red ya está formada y al aumentar la densidad sólo se añaden enlaces adicionales que forman triángulos al ritmo característico de una red. En cambio, antes de la transición el número de triángulos crece mucho más rápido de lo previsto debido a que se están añadiendo nodos a la vez que se están formando enlaces.

Los triángulos son estructuras importantes desde el punto de vista de la rigidez. N. Rivier en [49] considera un medio granular concebido como un conjunto de nodos (granos) conectados por barras rígidas si están en contacto. Si los granos en contacto ruedan sin deslizar, los puntos de contacto se comportan como bisagras flexibles. En un circuito formado por un número par de discos o esferas todos los componentes pueden rotar, de modo que si en un material como el descrito sólo hay circuitos pares, no se producen frustraciones de las rotaciones y no puede resistir ningún esfuerzo de corte. En cambio, en los circuitos impares las rotaciones sí están frustradas, y la presencia de estos circuitos es condición suficiente para la estabilidad del medio. Cuando se aplica un esfuerzo de corte, son los circuitos impares los que lo bloquean y, cuando se rompen, el material se deforma.

En estudios previos de la transición al estado rígido de un medio granular comprimido isotrópicamente, por ejemplo [47], se atribuye la rigidez a la aparición de cadenas lineales de fuerzas grandes que conectan los extremos del sistema. Sin embargo, una cadena lineal de discos o esferas no es estable frente a una fuerza de compresión longitudinal a menos que se frustren las rotaciones

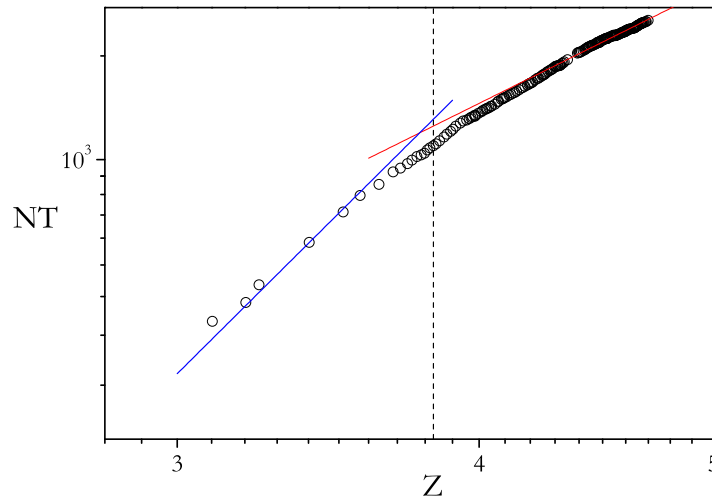


Figura 5.22: Número de triángulos frente al número de coordinación en escala logarítmica. La curva azul es proporcional a Z^6 y la roja a Z^3 , que es lo esperado al llenar aleatoriamente los enlaces de una red [116]. La línea vertical está en $Z = 3,83$, el número de coordinación crítico encontrado en el ajuste de la figura Fig. 5.4.

entre sus componentes. En este trabajo se ha argumentado cómo la transición al estado rígido de un sistema bajo compresión isotrópica puede caracterizarse, entre otras propiedades, por el desarrollo de una estructura poligonal dominada por triángulos, cuyo número aumenta de manera crítica, es decir, con una ley de potencias. La imagen de la transición por rigidez que emerge de estas consideraciones es la siguiente: en primer lugar, justo antes de la transición se desarrolla, en efecto, una estructura lineal, Fig. 5.19, seguida, en torno -y por encima- del punto de transición de una estructura poligonal dominada por circuitos impares (triángulos) que, a través de la frustración de las rotaciones, proporciona estabilidad a las cadenas lineales. El aumento en el número de triángulos puede constatararse tanto en función de la densidad del sistema, figura Fig. 5.21 como del número de coordinación, figura Fig. 5.22.

En este trabajo, las estructuras que se desarrollan dentro del medio granular se han definido y analizado recurriendo a nociones topológicas para eliminar las ambigüedades en la definición de, por ejemplo, las cadenas de fuerzas que se utilizan en otros trabajos. En las secciones previas se ha mostrado cómo este método puede ser útil en la caracterización de las propiedades estáticas y dinámicas de un medio granular.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

En este capítulo se resumirán las principales conclusiones alcanzadas en este trabajo, así como posibles líneas de investigación futuras.

Se ha mostrado que la ley de Beverloo no es capaz de ajustar los resultados del flujo para orificios de salida del orden del tamaño de los granos. Se ha comprobado que la densidad del material en la región de salida no es una constante, sino que aumenta de forma exponencial (con saturación) en función del diámetro del orificio. Tomando en cuenta esta dependencia, se ha conseguido ajustar todo el rango de valores del flujo analizados mediante una ley de Beverloo modificada que puede obtenerse mediante un argumento basado en la presencia de arcos en el silo que obstruyen el flujo.

El flujo presenta una transición cuando el tamaño del orificio se aproxima al tamaño característico de los granos. La estadística de las fluctuaciones es no gaussiana, presentando colas anchas, en el caso de orificios pequeños y gaussiana para los grandes. Se ha mostrado que estas diferentes estadísticas se relacionan con diferentes comportamientos de la amplitud de las oscilaciones del flujo de salida, que decrecen de forma cuadrática al aumentar el tamaño del orificio, para orificios de salida pequeños, pero son constantes para orificios grandes. Además, la estadística de las fluctuaciones es no gaussiana en el caso de orificios pequeños y gaussiana para los grandes. Por lo tanto, existe algún tipo de transición cuando el tamaño del orificio pasa de ser similar al tamaño característico de los granos a ser mayor. Puede especularse que cuando el orificio de salida es pequeño se producen correlaciones en el movimiento de los granos, lo que favorece la formación de arcos y da lugar a la estadística anómala, no gaussiana. A su vez, la aparición de arcos se relaciona directamente con la modificación de la ley de Beverloo introducida.

La existencia de una transición al pasar de orificios pequeños a orificios grandes se ve reforzada al analizar el flujo al nivel del movimiento de los granos. Analizando el inicio de la descarga se ha mostrado que para orificios grandes el flujo presenta un transitorio, caracterizado por movimientos cooperativos de los granos y estadística no gaussiana, seguido por una fase en la que el flujo es estacionario y la estadística de los granos es gaussiana. Cuando el orificio de salida es pequeño, en cambio, no se aprecia de forma clara esta distinción entre régimen transitorio y estacionario, sino que los movimientos cooperativos de los granos persisten durante mucho tiempo, con distribuciones que no tienden a hacerse gaussianas. Puede concluirse, de nuevo, que en presencia de un orificio de salida pequeño se introducen correlaciones en los movimientos de los granos que, al nivel de los movimientos individuales, se manifiestan como movimientos cooperativos.

Asumir la presencia de correlaciones en el movimiento de los granos cuando el orificio de salida es pequeño permite, por tanto, explicar características del flujo tanto a nivel macroscópico como a nivel microscópico. Además, las correlaciones son importantes desde el punto de vista del modelado matemático. En efecto, la ecuación de difusión “normal” es una consecuencia directa del teorema central del límite, por lo que si se desea obtener una ecuación análoga en presencia de correlaciones, es preciso encontrar alguna forma de generalización de dicho teorema. Una posible dirección consiste en aceptar distribuciones con momentos divergentes, obteniéndose las funciones estables de Lévy. Estas distribuciones se pueden obtener como soluciones de una ecuación de difusión fraccionaria y describen procesos subdifusivos. Por tanto, las correlaciones hacen necesaria otro tipo de generalización así como otras formas de la ecuación de difusión. En este trabajo se ha apuntado a la posibilidad de usar una ecuación no lineal, cuyas soluciones sí describen los datos obtenidos.

Puesto que los arcos son las estructuras que bloquean el flujo en los silos, en el capítulo cuarto se han analizado las propiedades de los arcos en depósitos granulares. Propiedades de estos depósitos, como su densidad, se han modificado sometidos a una excitación vertical. De los análisis efectuados, puede concluirse que los arcos se relacionan directamente con propiedades físicas del sistema: al aumentar el número de arcos disminuyen la densidad y el número de coordinación del empaquetamiento. También hay una relación con el desorden: los empaquetamientos desordenados presentan mayor número de arcos que los ordenados. Cuando estas propiedades se contemplan como funciones de la intensidad de agitación se concluye que hay una transición suave desde un estado ordenado, con elevada densidad y número de coordinación y pocos arcos, a intensidades bajas, hasta un estado desordenado con un mayor número de arcos a intensidades altas de batido. Otro resultado que refuerza la existencia de dos estados es la distribución de tamaños de los arcos, que es gaussiana para intensidades de batido altas, mientras que resulta exponencial a intensidades bajas.

Las configuraciones débilmente agitadas presentan dominios ordenados separados por zonas de desorden, lo que permite concluir que el ordenamiento se produce por el crecimiento de pequeños dominios ordenados, separados entre sí, que al unirse crean fronteras desordenadas. Este crecimiento paulatino de los dominios explica, además, que la transición sea suave y no abrupta.

Por último, al analizar depósitos sin información de la historia del proceso de sedimentación se concluye que la identificación de arcos sólo puede hacerse con cierto éxito en depósitos desordenados. Esta conclusión es importante desde el punto de vista experimental, dada la gran dificultad de seguir todo el proceso de caída de los granos en un experimento real.

Debido a la importancia de la red de fuerzas en los medios granulares, su estructura topológica ha sido analizada en el caso de un medio comprimido isotrópicamente, concluyéndose que las principales propiedades topológicas son independientes de la polidispersidad de tamaño, fricción del medio, presión aplicada, geometría de la celda y tamaño de la muestra, dentro de los rangos de valores estudiados. La robustez de los resultados indica que los conceptos de redes complejas son útiles en el análisis de los medios granulares.

En sistemas atascados la red de fuerzas presenta una transición desde un estado muy conectado de estructura poligonal hacia un estado de estructura lineal. Esta transición se produce en

función del valor del umbral de fuerza por debajo del cual un contacto es una arista de la red. El primer estado se obtiene al considerar valores bajos de dicho umbral, lo que da lugar a que los contactos con una fuerza pequeña sean aristas, mientras que el segundo se obtiene para valores altos del umbral, en cuyo caso sólo las fuerzas grandes son aristas de la red. La separación entre ambos estados está dada por una fuerza aproximadamente igual a la media, que es el valor donde aparece el máximo en la distribución de fuerzas de contacto. La diferente estructura de ambas redes corresponde a sus diferentes funciones: la red lineal de fuerzas grande percola el sistema y aparece como respuesta a esfuerzos externos. En cambio, la red poligonal de fuerzas pequeñas proporciona estabilidad a las cadenas de fuerzas grandes.

La topología de la red de contactos presenta una transición desde una estructura lineal a una poligonal en el caso de un medio granular comprimido isotrópicamente. Esta transición coincide con la transición por rigidez en dicho sistema, lo que permite concluir que la estructura poligonal juega un papel importante en la rigidez del estado final. Esta conclusión se apoya en que las estructuras triangulares -que intrínsecamente rígidas- constituyen un parámetro de orden de la transición y son, además las estructuras dominantes en el estado final.

Estos resultados refuerzan la conclusión general de que la topología del medio granular tal como la desvela un enfoque de redes complejas se relaciona con propiedades físicas del sistema tanto en estado estático como dinámico, por lo que el análisis de la red de fuerzas como una red compleja aparece como un análisis estructural fructífero que se añade a los ya presentes en la literatura.

Los resultados alcanzados en el presente trabajo pueden extenderse en varias líneas. En el flujo de masa de un silo, el principal resultado es la modificación de la ley de Beverloo, que ha sido verificada también en experimentos en silos a escala en dos y tres dimensiones. Sin embargo, sería deseable medir experimentalmente la densidad en la región de salida, así como comparar datos experimentales y numéricos de las fluctuaciones del flujo y de las avalanchas que se producen entre dos obstrucciones consecutivas. El objetivo es encontrar argumentos más rigurosos que los presentados para la ley de Beverloo modificada.

En el caso del movimiento individual de los granos también se precisan argumentos rigurosos que lleven del modelo microscópico propuesto a la ecuación de difusión no lineal. De esta manera se podría tener, además, una interpretación del índice entrópico en el contexto de la difusión de los granos. Una posible interpretación sería en términos de correlaciones entre las partículas, que estarían presentes al inicio de la descarga y se van atenuando en el régimen estacionario. Estas correlaciones podrían, a su vez, relacionarse con la formación de arcos a la salida del silo.

Los arcos analizados en el cuarto capítulo son estructuras definidas geoméricamente, sin hacer uso de la información que dan las fuerzas. Los resultados alcanzados son válidos para sistemas en los que sólo hay fuerzas normales o en los que la fricción es despreciable, pero si se consideran fuerzas de fricción hay contribuciones adicionales a la estabilidad. Por tanto, un estudio más realista extendería la definición de arco de manera que incluyera a las estructuras estabilizadas por la fricción.

En el capítulo quinto se ha mostrado cómo la topología de la red de fuerzas proporciona una caracterización robusta de los medios granulares y cómo puede ayudar en la comprensión de la transición entre estados diluidos y atascados. El flujo en un silo es un candidato ideal para ex-

tender la aplicación de éste método. El inicio de la descarga constituye la transición de un estado atascado a uno diluido, mientras que los atascos que se producen cuando los orificios de salida son pequeños, son semejantes a la transición líquido-sólido estudiada.

La transición por rigidez del sistema comprimido isotrópicamente es especialmente compleja debido a la fricción, puesto que en este caso el número de coordinación crítico no tiene por qué ser el correspondiente al valor isostático. Por consiguiente, cabe preguntarse qué mecanismo selecciona el valor de este parámetro y cómo dicho valor depende de propiedades del medio como la fricción, la polidispersidad o el grado de deformación de los discos. La extensión del análisis a tres dimensiones es un paso natural. En este sentido cabe investigar si la red de fuerzas y la de contactos presentan propiedades análogas a las obtenidas en el presente trabajo, tanto en un sistema estático como en el curso de una compresión, o si existen estructuras mínimas que se puedan relacionar con la rigidez del medio, por ejemplo los tetraedros.

El análisis puramente topológico de la red de fuerzas puede extenderse, si se quiere, en tantas direcciones como conceptos y herramientas proporciona el campo de las redes complejas. Sin embargo, el análisis que le parece más interesante al autor del presente trabajo es el del laplaciano de la red de contactos. El laplaciano es el operador relacionado con la difusión de información en la red, y, en el caso de la red del medio granular, esa información son las fuerzas. Por tanto, se puede especular que analizando las propiedades del laplaciano (o un laplaciano con pesos proporcionales a las fuerzas en los contactos) se puedan obtener pistas acerca de la forma y características de la distribución de fuerzas.

En este trabajo se ha realizado una exploración del uso de estadísticas anómalas y redes complejas para ahondar en la comprensión de los medios granulares. La riqueza conceptual y física de estos campos y su intenso estudio en la comunidad física auguran un futuro de fascinantes desarrollos de los que este trabajo pretende ser una parte.

Bibliografía

- [1] J. Duran. *Sands, powders and grains*. Springer (2000).
- [2] M. Faraday. *On a peculiar class of acoustical figures; and on certain forms assumed by groups of particles upon vibrating elastic surfaces*. Philos. Trans. Roy. Soc. London. **52**, (1831), p. 299.
- [3] C. Laroche, S. Doady, S. Fauve. *Convective flow of granular masses under vertical vibrations*. J. Phys. France **50**, (1989), p. 699.
- [4] W. J. W. Rankine. *On the stability of loose earth*. Philos. Trans. Roy. Soc. London **147**, (1857), p. 9.
- [5] I. Roberts. *Determination of the vertical and lateral pressures of granular substances*. Proc. Roy. Soc. **36**, (1884), p. 226.
- [6] H. A. Janssen. *Tests on grain pressure silos*. Z. Vereins Deutsch Ing. **39**, (1895), p. 1045.
- [7] O. Reynolds. *On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. with experimental illustrations*. Phil. Mag. Ser. 5 **50**, (1885), p. 469.
- [8] R. A. Bagnold. *The physics of blown sand and desert dunes*. Proc. Roy. Soc. London Ser A **225**, (1954), p. 49.
- [9] P. K. Haff. *Grain flow as a fluidmechanical phenomenon*. J. Fluid Mech. **154**, (1983), p. 187.
- [10] P. Résibois, M. D. Leener. *Classical kinetic theory of fluids*. AstroLogos Books (2004).
- [11] V. Garzó, J. Dufty. *Homogeneous cooling state for a granular mixture*. Phys. Rev. E **60**, (1999), p. 1.
- [12] N. Brilliantov, T. Poschel. *Kinetic theory of granular gases*. Oxford University Press (2004).
- [13] I. Goldhirsh, M. L. Tan, G. Zanetti. *A molecular dynamical study of granular fluids i: the unforced granular gas in two dimensions*. J. Sci. Comput. **8**, (1993), p. 1.
- [14] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero. *Origin of density clustering in a freely evolving granular gas*. Phys. Rev. E **60**, (1999), p. 3150.
- [15] A. Goldstein, M. Shapiro. *Mechanics of collisional motion of granular materials. part 1. general hydrodynamic equations*. J. Fluid Mech. **282**, (1995), p. 75.
- [16] V. Garzó, J. Dufty. *Dense fluid transport for inelastic hard spheres*. Phys. Rev. E **45**, (1999), p. 5895.

- [17] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim, A. Santos. *Hydrodynamics for granular flow at low density*. Phys. Rev. E **58**, (1998), p. 4638.
- [18] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero, R. García-Rojo. *Self-diffusion in freely evolving granular gases*. Phys. Fluids **12**, (2000), p. 876.
- [19] J. Lutsko, J. J. Brey, J. Dufty. *Diffusion in a granular fluid. ii. simulation*. Phys. Rev. E **65**, (2002), p. 051304.
- [20] G. MiDi. *On dense granular flows*. Euro. Phys. J. E **14**, (2004), p. 341.
- [21] F. D. Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, F. Chevoir. *Rheophysics of dense granular materials: Discrete simulation of plane shear flows*. Phys. Rev. E **72**, (2005), p. 021309.
- [22] I. Iordanoff, M. M. Khonsari. *Granular lubrication: toward an understanding of the transition between kinetic and fluid regime*. ASME J. Tribol **126**, (2004), p. 137.
- [23] R. M. Nedderman, U. Tüzün. *A kinematic model for the flow of granular materials*. Powder Technology **22**, (1979), p. 243.
- [24] A. Samadani, A. Pradhan, A. Kudrolli. *Size segregation of granular matter in silo discharges*. Phys. Rev. E **60**, (1999), p. 7203.
- [25] J. Choi, A. Kudrolli, M. Z. Bazant. *Velocity profile of granular flows inside silos and hoppers*. J. Phys.: Condens. Matter **17**, (2005), p. 2533.
- [26] J. Litwiniszyn. *The model of a random walk of particles adapted to researches on problems of mechanics of granular media*. Bull. Acad. Pol. Sci. **11**, (1963), p. 593.
- [27] J. Mullins. *Stochastic theory of particle flow under gravity*. J. Applied Physics **43**, (1972), p. 665.
- [28] J. Choi, A. Kudrolli, R. R. Rosales, M. Z. Bazant. *Diffusion and mixing in gravity-driven dense granular flows*. Phys. Rev. Lett. **92**, (2004), p. 174301.
- [29] M. Z. Bazant. *The spot model for random-packing dynamics*. Mech. Mater. **38**, (2006), p. 717.
- [30] R. M. Nedderman. *Statics and kinematics of granular materials*. Cambridge University Press (1991).
- [31] W. A. Beverloo, H. A. Leniger, J. V. de Velde. *The flow of granular solids through orifices*. Chem. Eng. Sci. **15**, (1961), p. 260.
- [32] C. Mankoc, A. Janda, R. Arévalo, J. M. Pastor, I. Zuriguel, A. Garcimatín, D. Maza. *The flow rate of granular materials through an orifice*. Gran. Matt. **9**, (2007), p. 407.
- [33] A. Janda. *Flujo y atascos de un medio granular en la descarga de un silo bidimensional*. Tesina, Universidad de Navarra (2008).
- [34] A. Medina, J. A. Cordoba, E. Luna, C. Treviño. *Velocity field measurements in granular gravity flow in a near 2d silo*. Phys. Lett. A **250**, (1998), p. 111.
- [35] R. L. Brown, J. C. Richards. *Principles of Powder Mechanics*. Pergamon Press (1970).

- [36] D. M. Mueth, H. M. Jaeger, S. R. Nagel. *Force distribution in a granular medium*. Phys. Rev. E **57**, (1998), p. 3164.
- [37] D. L. Blair, N. W. Mueggenburg, A. H. Marshall, H. M. Jaeger, S. R. Nagel. *Force distributions in three-dimensional granular assemblies: Effects of packing order and interparticle friction*. Phys. Rev. E **63**, (2001), p. 041304.
- [38] J. Brujic, S. F. Edwards, I. Hopkinson, H. A. Makse. *Measuring the distribution of interdroplet forces in a compressed emulsion system*. Physica A **327**, (2003), p. 201.
- [39] J. W. Landry, G. S. Grest, L. E. Silbert, S. J. Plimpton. *Confined granular packings: Structure, stress, and forces*. Phys. Rev. E **67**, (2003), p. 041303.
- [40] C. S. O'Hern, S. A. Langer, A. J. Liu, S. R. Nagel. *Force distributions near jamming and glass transitions*. Phys. Rev. Lett. **86**, (2001), p. 111.
- [41] L. E. Silbert, D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine. *Analogies between granular jamming and the liquid-glass transition*. Phys. Rev. E **65**, (2002), p. 051307.
- [42] S. N. Coppersmith, C. h. Liu, S. Majmudar, O. Narayan, T. A. Witten. *Model for force fluctuations in bead packs*. Phys. Rev. E **53**, (1996), p. 4673.
- [43] J. E. S. Socolar. *Average stresses and force fluctuations in noncohesive granular materials*. Phys. Rev. E. **57**, (1998), p. 3204.
- [44] L. Landau, E. Lifshitz. *Theory of elasticity*. Pergamon Press (1959).
- [45] P. Claudin, J. P. Bouchaud, M. E. Cates, J. P. Wittmer. *Models of stress fluctuations in granular media*. Phys. Rev. E. **57**, (1998), p. 4441.
- [46] R. P. Behringer, D. Howell, L. Kondic, C. V. S. Tennakoon. *Predictability and granular materials*. Physica A **133**, (1999), p. 1.
- [47] H. A. Makse, D. L. Johnson, L. M. Schwartz. *Packing of compressible granular materials*. Phys. Rev. Lett. **84**, (2000), p. 4160.
- [48] J. F. Peters, M. Muthuswamy, J. Wibowo, A. Tordesillas. *Characterization of force chains in granular material*. Phys. Rev. E. **72**, (2005), p. 041307.
- [49] N. Rivier. *Extended constraints, arches and soft modes in granular materials*. J. Non-Cryst. Solids **352**, (2006), p. 42.
- [50] R. C. Ball, R. Blumenfeld. *Stress field in granular systems: Loop forces and potential formulation*. Phys. Rev. Lett. **88**, (2002), p. 115505.
- [51] E. Somfai, M. van Hecke, W. G. Ellenbroek, K. Shundyak, W. van Saarloos. *Critical and noncritical jamming of frictional grains*. Phys. Rev. E **75**, (2007), p. 020301.
- [52] R. C. Ball, D. V. Grinev. *The stress transmission universality classes of rigid grain powders*. Arxiv preprint cond-mat/9810124 .
- [53] S. F. Edwards, C. C. Mounfield. *A theoretical model for the stress distribution in granular matter: I. basic equations*. Physica A **226**, (1996), p. 1.
- [54] S. F. Edwards, R. B. S. Oakeshott. *Theory of powders*. Physica D **157**, (1989), p. 1080.

- [55] A. Mehta, S. F. Edwards. *Statistical mechanics of powder mixtures*. Physica A **157**, (1989), p. 1091.
- [56] S. F. Edwards, D. V. Grinev. *Statistical mechanics of vibration-induced compaction of powders*. Phys. Rev. E **58**, (1998), p. 4758.
- [57] S. F. Edwards, D. V. Grinev. *Statistical mechanics of granular materials: stress propagation and distribution of contact forces*. Gran. Mat. **4**, (2003), p. 147.
- [58] P. T. Metzger. *Granular contact force density of states and entropy in a modified edwards ensemble*. Phys. Rev. E **70**, (2004), p. 051303.
- [59] H. A. Makse, J. Brujic, S. F. Edwards. *Statistical mechanics of jammed matter*. In *The Physics of Granular Media*. Wiley (2005).
- [60] E. R. Nowak, J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger, S. R. Nagel. *Density fluctuations in vibrated granular materials*. Phys. Rev. E **57**, (1998), p. 1971.
- [61] R. Blumenfeld, S. F. Edwards. *Granular entropy: Explicit calculations for planar assemblies*. Phys. Rev. Lett **90**, (2003), p. 114303.
- [62] T. S. Majmudar, M. Sperl, S. Luding, R. P. Behringer. *Jamming transition in granular systems*. Phys. Rev. Lett **98**, (2007), p. 058001.
- [63] S. Henkes, B. Chakraborty. *Jamming as a critical phenomenon: A field theory of zero-temperature grain packings*. Phys. Rev. Lett **95**, (2005), p. 198002.
- [64] A. Donev, S. Torquato, F. H. Stillinger. *Pair correlation function characteristics of nearly jammed disordered and ordered hard-sphere packings*. Phys. Rev. E **71**, (2005), p. 011105.
- [65] C. O'Hern, S. A. Langer, A. J. Liu, S. R. Nagel. *Random packings of frictionless particles*. Phys. Rev. Lett **88**, (2002), p. 075507.
- [66] C. S. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, S. R. Nagel. *Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder*. Phys. Rev. E **68**, (2003), p. 011306.
- [67] M. Wyart, L. E. Silbert, S. R. Nagel, T. A. Witten. *Effects of compression on the vibrational modes of marginally jammed solids*. Phys. Rev. E **72**, (2005), p. 051306.
- [68] T. Aste. *Volume fluctuations and geometrical constraints in granular packs*. Phys. Rev. Lett **96**, (2006), p. 018002.
- [69] T. Aste, T. D. Matteo, M. Saadatfar, T. J. Senden, M. Schröter, H. L. Swinney. *An invariant distribution in static granular media*. Europhys. Lett. **79**, (2007), p. 24003.
- [70] A. V. Anikeenko, N. N. Medvedev. *Polytetrahedral nature of the dense disordered packings of hard spheres*. Phys. Rev. Lett. **98**, (2007), p. 235504.
- [71] R. Albert, A. L. Barabási. *Statistical mechanics of complex networks*. Rev. Mod. Phys. **74**, (2002), p. 47.
- [72] M. E. J. Newman. *The structure and function of complex networks*. SIAM Review **45**, (2003), p. 167.
- [73] L. F. Costa, F. A. Rodrigues, G. Travieso, P. R. V. Boas. *Characterization of complex networks: A survey of measurements*. Adv. Phys. **56**, (2007), p. 167.

- [74] D. J. Watts, S. H. Strogatz. *Collective dynamics of 'small-world' networks*. Nature **393**, (1998), p. 440.
- [75] A. Rapoport. *Contribution to the theory of random and biased nets*. Bulletin of Mathematical Biology **19**, (1957), p. 257.
- [76] P. Erdős, A. Renyi. *On random graphs*. Publ. Math. Debrecen **6**, (1959), p. 290.
- [77] A. Barrat, M. Weigt. *On the properties of small-world network models*. Eur. Phys. J. B **13**, (2000), p. 547.
- [78] M. E. J. Newman, C. Moore, D. J. Watts. *Mean-field solution of the small-world network model*. Phys. Rev. Lett. **84**, (2000), p. 3201.
- [79] P. L. Krapivsky, S. Redner, F. Leyvraz. *Connectivity of growing random networks*. Phys. Rev. Lett. **85**, (2000), p. 4629.
- [80] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, A. N. Samukhin. *Structure of growing networks with preferential linking*. Phys. Rev. Lett. **85**, (2000), p. 4633.
- [81] J. S. Andrade, H. J. Herrmann, R. F. S. Andrade, L. R. da Silva. *Apollonian networks: Simultaneously scale-free, small world, euclidean, space filling, and with matching graphs*. Phys. Rev. Lett. **94**, (2005), p. 018702.
- [82] P. M. Adler. *Transport processes in fractals. iii: Taylor dispersion in two examples of fractal capillary networks*. Int. J. Multiphase Flow **11**, (1985), p. 91.
- [83] J. A. Dodds. *The porosity and contact points in multicomponent random sphere packings calculated by a simple statistical geometric model*. J. Colloid. Interphase Sci. **77**, (1980), p. 317.
- [84] S. Ostojic, E. Somfai, B. Nienhuis. *Scale invariance and universality of force networks in static granular matter*. Nature **439**, (2006), p. 828.
- [85] D. C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge University Press (2004).
- [86] J. Schäfer, S. Dippel, D. E. Wolf. *Force schemes in simulations of granular materials*. J. Phys. I **6**, (1996), p. 5.
- [87] M. P. Allen, D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press (1989).
- [88] L. E. Silbert, G. S. Grest, J. W. Landry. *Statistics of the contact network in frictional and frictionless granular packings*. Phys. Rev. E **66**, (2002), p. 061303.
- [89] R. L. Burden, J. D. Faires. *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamérica (1991).
- [90] H. Goldstein. *Mecánica Clásica*. Aguilar (1966).
- [91] T. Pöschel, T. Schwager. *Computational granular dynamics: models and algorithms*. Springer (2005).
- [92] M. Jean, J. J. Moreau. *Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections*. In *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1992).

- [93] T. Unger, J. Kertesz. *The contact dynamics method for granular media*. In *Modelling of complex systems: seventh granada lectures*, AIP Conference Proceedings (1992).
- [94] G. A. Bird. *Molecular dynamics and the direct simulation of gas flow*. Oxford Science Publications (1994).
- [95] M. Müller, S. Luding, H. J. Herrmann. *Simulations of vibrated granular media in 2d and 3d*. In *Friction, Arching and Contact Dynamics*. World Scientific (1997).
- [96] H. J. Herrmann. *Simulating granular media on the computer*. 3rd Granada Lectures in Computational Physics. Springer (1995).
- [97] S. Moka, P. R. Nott. *Statistics of particle velocities in dense granular flows*. Phys. Rev. Lett. **95**, (2005), p. 068003.
- [98] C. S. Campbell. *Self-diffusion in granular shear flows*. J. Fluid. Mech. **348**, (1997), p. 85.
- [99] A. Compte. *Stochastic foundations of fractional dynamics*. Phys. Rev. E **53**, (1996), p. 4193.
- [100] A. Plastino, A. R. Plastino. *Non-extensive statistical mechanics and generalized fokker-planck equation*. Physica A **222**, (1995), p. 347.
- [101] A. Compte, D. Jou. *Non-equilibrium thermodynamics and anomalous diffusion*. J. Phys. A **29**, (1996), p. 4321.
- [102] L. Borland. *Microscopic dynamics of the nonlinear fokker-planck equation: A phenomenological model*. Phys. Rev. E **57**, (1998), p. 6643.
- [103] C. Tsallis. *Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics*. J. Stat. Phys. **52**, (1988), p. 479.
- [104] In M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, U. Frisch, eds., *Levy flights and related topics in physics*. Springer (1994).
- [105] D. H. Zanette. *Statistical-thermodynamical foundations of anomalous diffusion*. Braz. J. Phys. **29**, (1999), p. 108.
- [106] M. Ausloos, R. Lambiotte. *Brownian particle having a fluctuating mass*. Phys. Rev. E **73**, (2006), p. 011105.
- [107] A. Mehta, G. C. Barker. *The dynamics of sand*. Rep. Prog. Phys. **57**, (1994), p. 383.
- [108] L. A. Pugnaloni, G. C. Barker, A. Mehta. *Multi-particle structures in non-sequentially reorganized hard sphere deposits*. Adv. complex Syst. **4**, (2001), p. 289.
- [109] L. A. Pugnaloni, M. G. Valluzzi, L. G. Valluzzi. *Arching in tapped deposits of hard disks*. Phys. Rev. E **73**, (2006), p. 051302.
- [110] I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni, A. Garcimartín, D. Maza. *Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition*. Phys. Rev. E **71**, (2005), p. 030301.
- [111] L. A. Pugnaloni, G. C. Barker. *Structure and distribution of arches in shaken hard sphere deposits*. Physica A **337**, (2004), p. 428.

-
- [112] K. To, P. Lai, H. K. Pak. *Jamming of granular flow in a two-dimensional hopper*. Phys. Rev. Lett. **86**, (2001), p. 71.
- [113] C. Song, S. Havlin, H. A. Makse. *Self-similarity of complex networks*. Nature **433**, (2005), p. 392.
- [114] C. Song, L. A. Gallos, S. Havlin, H. A. Makse. *How to calculate the fractal dimension of a complex network: the box covering algorithm*. J. Stat. Mech. p. P03006.
- [115] F. Radjai, M. Jean, J. J. Moreau, S. Roux. *Force distributions in dense two-dimensional granular systems*. Phys. Rev. Lett. **77**, (1996), p. 274.
- [116] A. Smart, F. Ottino. *Evolving loop structure in gradually tilted two-dimensional granular packings*. Phys. Rev. E **77**, (2008), p. 041307.

