

Simulación por dinámica molecular del efecto de nuez brasileña

R. Guerrero¹ and D. Veloza¹

¹Métodos de simulación física, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia

(Dated: 15 de mayo de 2018)

I. INTRODUCCIÓN

Cuando se agita un contenedor con un medio granular dentro, las partículas de mayor tamaño (acá llamadas nueces), tienden a agruparse en la parte superior incluso si su masa es mayor a la de las partículas más pequeñas. Este efecto, que contradice la intuición, es conocido como *efecto de nuez brasileña*. Diversos artículos han intentado explicar el fenómeno³. Uno de los argumentos propuestos consiste en que cuando el contenedor se agita, se generan espacios vacíos bajo las nueces que son llenados por las partículas pequeñas haciendo que de a pocos suba la posición de las nueces⁷; también se han hecho propuestas que sugieren que el estado termodinámico de equilibrio está dado por la distribución característica del efecto de nuez brasileña⁵. Existen además explicaciones topológicas que funcionan en el límite cuasi-estático¹ y otras que dan predominancia a fenómenos convectivos⁴. De esta última explicación se han obtenido resultados experimentales que demuestran su existencia².

En este trabajo se realiza una aproximación al efecto de nuez brasileña de forma computacional. Para esto se utilizaron métodos de dinámica molecular programados en *C++*, con el objetivo de simular los choques entre partículas y con las paredes del recipiente. La evolución temporal del sistema se llevó a cabo por medio del algoritmo *Omelyan PEFRL*.

Las interacciones tomadas en cuenta entre granos fueron: la fuerza de Hertz, la disipación plástica, y la fricción estática y dinámica. Para estas últimas fuerzas que aparecen con un carácter tangencial se utilizó un modelo que usa un resorte para simular el contacto (resorte de Cundall). En la fuerza de Hertz se tiene un parámetro K que representa que tanta fuerza normal se hacen dos cuerpos dada cierto valor de interpenetración. En la disipación plástica se tiene otro parámetro γ , dadas una velocidad normal relativa entre los cuerpos y sus masas, γ da cuenta de la pérdida de energía en el choque. Se necesitan al menos otros dos parámetros para las fricciones, el primero es el valor de la constante del resorte asociado al contacto tangencial $K_{cundall}$ y el segundo μ determina si la simulación debe usar fricción estática o dinámica⁶.

La simulación fue realizada en dos y tres dimensiones; los parámetros para las colisiones fueron: $K = 10^4$, $\gamma = 50$, $K_{cundall} = 10$ y $\mu = 0,4$; para la gravedad se tomó $g = 9,8$. Para la simulación en 2D se usó un recipiente rectangular de ancho $L_x = 200$ y altura

$L_y = 400$ y para la simulación en 3D se usó un cilindro de altura $h = y$ y radio $r =$ (ver figura 1). En ambos casos la forma en la que se agitó el recipiente fue poniendo a oscilar la pared inferior de la cavidad, la oscilación se introdujo como una ley de Hooke tal que la constante del resorte K_{pared} era un parámetro libre para la simulación.

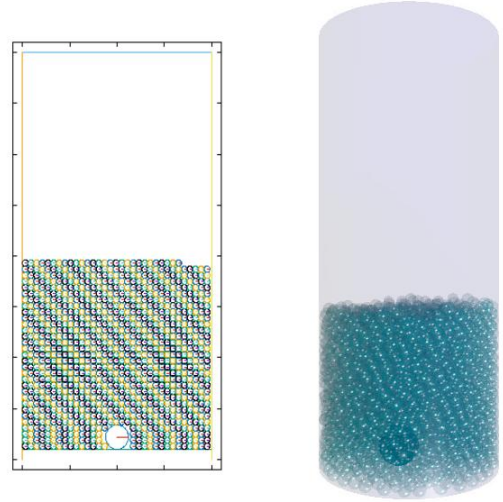


Figura 1. Visualización de la simulación realizada en 2D y 3D.

Con el objetivo de comprender mejor el movimiento de la nuez en el recipiente se tomaron distintas mediciones. La primera consistió en analizar la posición de la nuez en función del tiempo variando el parámetro K_{pared} . Esto fue realizado en 3-D y permitió observar si la velocidad de ascenso de la nuez depende de la frecuencia con que se mueve la pared. La siguiente medición consistió en observar si la posición horizontal inicial de la pelota afectaba su velocidad de ascenso o si llegaba a anularla, este análisis fue realizado en 2D. Finalmente se realizó un análisis de la convección en el sistema.

II. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Se midió la posición de una nuez de radio $R_n = 6,3$ y masa $M_n = 3$ en un contenedor cilíndrico de altura $h = 175$ y radio $R_{cil} = 24$. El número de partículas fue $N = 3600$, cada una con un radio $R_g = 1,8$ y masa $M_g = 2$. Esta medición se realizó induciendo un movimiento armónico con constante de Hooke K_{wall} a la

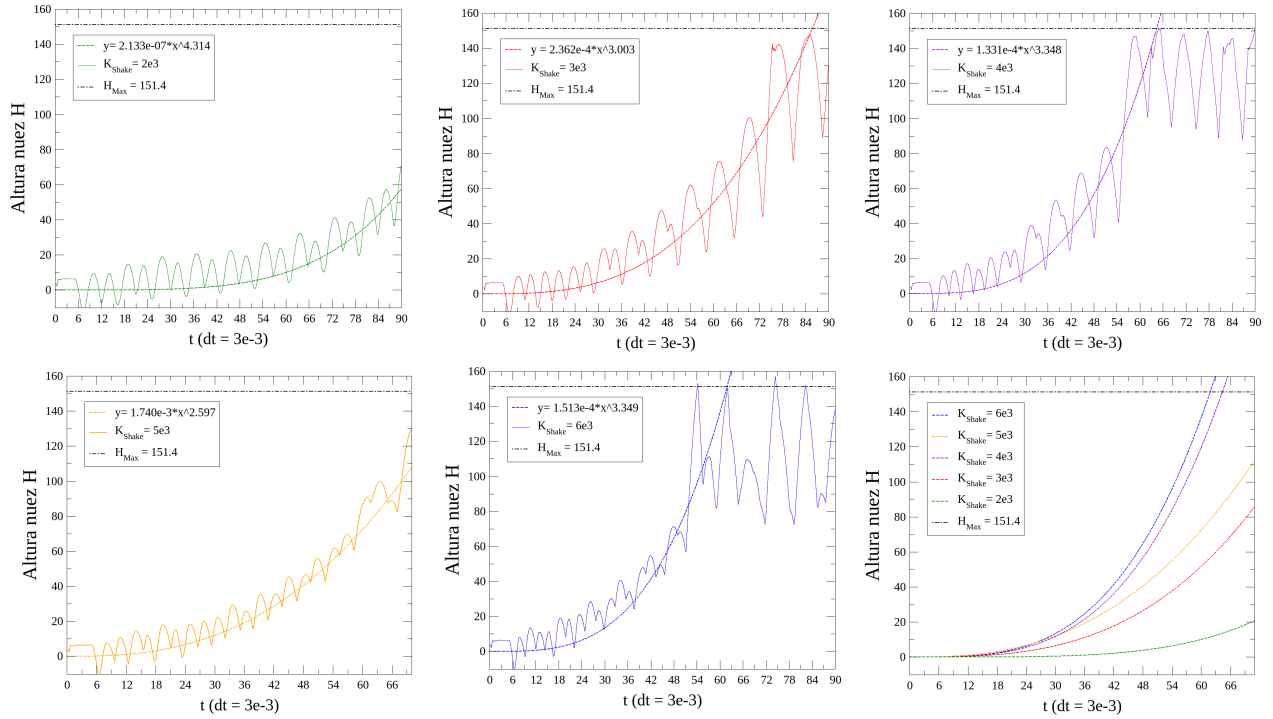


Figura 2. Altura de la nuez en función del tiempo para diferentes valores de K_{wall}

frontera cilíndrica y las paredes inferior y superior con una amplitud de $A = 8,75$.

En la figura 2 se encuentran las curvas de altura de la nuez en función del tiempo para valores de $K_{wall} = 2 \times 10^3$, 3×10^3 , 4×10^3 , 5×10^3 y 6×10^3 ; también se encuentran las regresiones asociadas a cada curva.

Se observa en cada una de las curvas que la altura de la nuez es aproximadamente constante al inicio. Esto se debe al hecho de que cuando comienza el movimiento la cantidad de partículas que se encuentran sobre la nuez es mucho mayor que la que tiene después de haber subido un poco. Independientemente de la razón por la cual suba la nuez, cuando se encuentra en el fondo, tiene que luchar contra el peso de la mayoría de las partículas mientras que una vez ha ascendido un poco el peso sobre ella es menor.

Tenemos también que la nuez asciende más rápido para valores de 4×10^3 , 5×10^3 y 6×10^3 mientras que para 3×10^3 el crecimiento sucede de forma más lenta; sin embargo, para 2×10^3 se encuentra que la nuez se mantiene más tiempo en una altura casi constante y cuando comienza a ascender lo hace bastante lento. De esta gráfica podemos ver que no hay una relación lineal entre velocidad media y parámetro K_{wall} : para valores pequeños tenemos una ascensión lenta que aumenta con el valor del parámetro, por otra parte llega un punto donde se satura el sistema, por lo que aún si se aumenta la frecuencia de oscilación no aumenta la velocidad.

En la figura 3 se encuentra una comparación para valores de K_{wall} de 4×10^3 y 5×10^3 . Podemos ver que ambas curvas comienzan de forma muy similar pero eventualmente cambia la velocidad de la nuez siendo esta mayor para el valor de $K_{wall} = 4 \times 10^3$. En el caso de 4×10^3 la oscilación de la nuez tiene una amplitud menor, sin embargo su frecuencia es mayor con respecto a la de 5×10^3 , en este sentido podemos pensar que el sistema tiene una frecuencia para la que existe "resonancia" y que esta se encuentra más cercana a este último valor. Decimos resonancia en el sentido de las oscilaciones que tiene la nuez alrededor de la regresión asociada.

Se observa que para el valor de 4×10^3 , las oscilaciones son mucho mayores a medida que aumenta el tiempo, esto recuerda a un fuerza externa sobre un sistema que excita modos de oscilación propios. En la figura 1 se observa que las oscilaciones son más grandes para 3×10^3 y 4×10^3 mientras que las demás tienden a estar más cercanos a su curva de regresión. Respecto a estas oscilaciones es importante resaltar que aparecen patrones en ciertas zonas de la curva, esto puede indicar que aunque oscile respecto a un punto medio, el sistema se comporta bajo ciertas condiciones de forma regular por lo que se podría intentar buscar una ecuación que de cuenta del ascenso de la nuez.

La siguiente medición quiso determinar como cambiaba la cinemática de la nuez dependiendo de la posición inicial en el fondo del contenedor. Esto se realizó en 2D

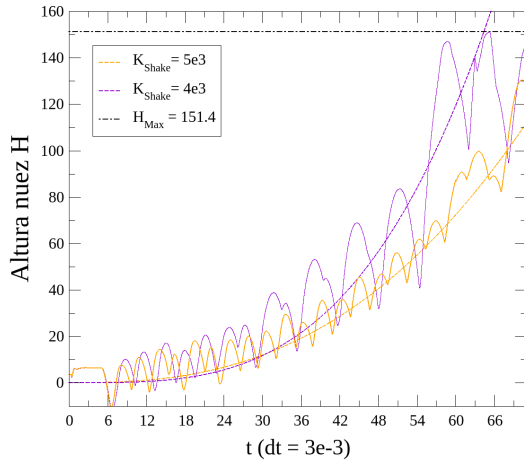


Figura 3. Comparación de la altura de la nuez para K_{wall} de 4×10^3 y 5×10^3

en un recipiente rectangular de ancho $L_x = 200$ y altura $L_y = 400$; en este caso el número de partículas fue $N = 2000$, la masa y radio de la nuez fueron $Mn = 6$ y $Rn = 12$ respectivamente y la masa y radio de las partículas $Mg = 1$ y $Rg = 3$; la constante de oscilación para la pared fue $K_{wall} = 5 \times 10^3$. En la figura 4 se observa que la altura de la nuez no depende del punto inicial, la ascensión se mantiene con la misma forma funcional y la nuez tiene aproximadamente la misma velocidad siempre.

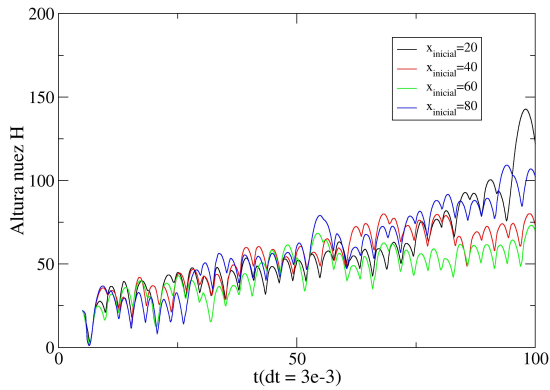


Figura 4. Altura de la nuez para diferentes valores de posición inicial en x

Sin embargo, se analizó también la coordenada x de la nuez para distintas posiciones iniciales (ver figura 5) y se encontró que esta tiende a ir hacia el centro del contenedor independientemente de donde empiece. Se encuentra también que la velocidad con la que se acerca al centro pareciera aumentar entre más cercana al centro se encuentre la nuez.

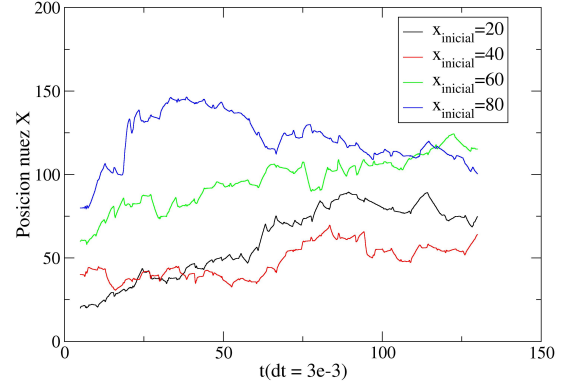


Figura 5. Coordenada x de la nuez para diferentes valores de posición inicial en x

Finalmente se intentó vislumbrar la aparición de convección debido al movimiento del contenedor. De nuevo estas mediciones se realizaron con en 2D con los mismos parámetros de la medición anterior. Sin embargo, se quitó la nuez del contenedor y se estudiaron las partículas solas. Se midió el promedio de las componentes verticales de la velocidad de las partículas que se encontraban entre x y $x + \Delta x$. Se tomó $\Delta x = 5$ por lo que se tomaron 40 mediciones. En la figura 6 se muestran los resultados:

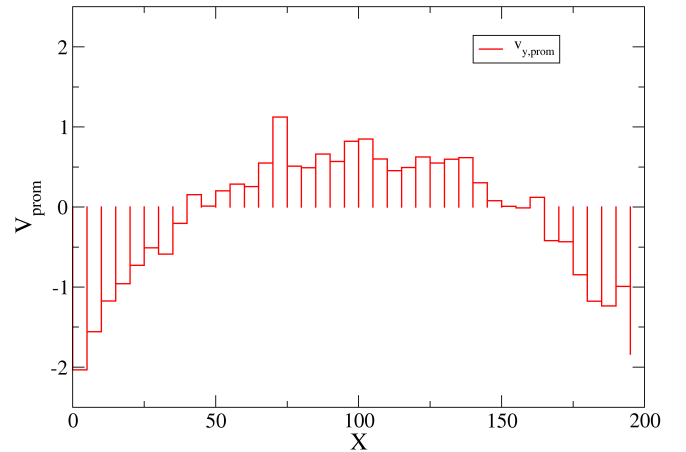


Figura 6. Coordenada x de la nuez para diferentes valores de posición inicial en x

Se observa como la componente promedio de la velocidad de las partículas cambia con la coordenada x . Además se hace evidente la existencia de convección; cerca a las paredes las partículas tienden a moverse hacia el piso mientras que a medida que se alejan de las paredes, la velocidad se invierte por lo que en la zona

central las partículas tienden a moverse hacia arriba. Es importante resaltar que este efecto de convección sucede al hacerse un promedio en el tiempo, si se hace un histograma de velocidades en un instante específico de tiempo no se encontrará lo mismo.

El efecto de convección se debe principalmente al movimiento de las paredes laterales pues estas se oponen al movimiento hacia arriba y hacia abajo de las partículas que se encuentran pegadas a ella, sin embargo, gracias a la gravedad, el movimiento predominante es hacia abajo. Por otra parte, debido a la existencia de un movimiento neto hacia abajo en las paredes, debe haber lugares donde las partículas suban para que se conserve el número de partículas. Debido a la simetría el lugar para ascender es el centro.

Para ver como se distribuye la velocidad en el espacio se realizó la figura 7 (se encuentra al final del texto) que muestra un promedio de velocidades para distintos puntos. En la figura se observa como efectivamente la velocidad en las paredes promedio tiende a ser hacia abajo y en el centro hacia arriba. Por otra parte nos muestra que en las zonas de transición existen vórtices; estos pueden ser responsables del movimiento horizontal encontrado que tiene a llevar a la nuez hacia el centro. Se aprecia también como se desarrollan carriles de velocidad horizontal unidireccional bastante pronunciado a ciertas alturas y en la región central. Esto puede ser la razón por la que la nuez de posición inicial $x_{inicial} = 80$ se mueve rápidamente de forma horizontal antes de comenzar a buscar el centro del recipiente.

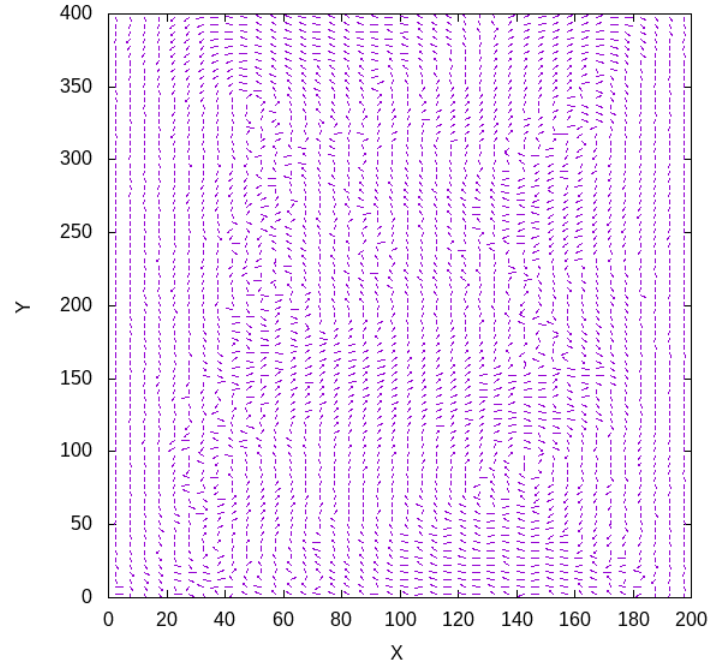


Figura 7. Campo de velocidades en 2-D

III. CONCLUSIONES

Existe una dependencia entre la velocidad a la que asciende una nuez y la frecuencia con la que se agita el recipiente en el que se encuentra. Para valores de frecuencia baja la nuez tiende a no ganar altura. Si se aumenta el valor de la frecuencia aumenta también la velocidad hasta que se llega a un punto de saturación donde aumentar la frecuencia no genera cambios en la forma en la que asciende la nuez. Se observa también que en ciertas partes del movimiento hacia arriba hay patrones, estos patrones pueden llegar a ser explicados de forma teórica por lo que habría que hacer la exploración correspondiente. Además, dependiendo de la frecuencia a la que se agite el contenedor también se registran mayores oscilaciones de la nuez respecto a un punto que ascienda con la curva de la regresión, esto puede indicar que el sistema tiene frecuencias a las que resuene”.

Se encontró además que la velocidad de ascensión no depende del lugar donde inicie la nuez en el fondo del contenedor. Por otra parte, la coordenada x de la nuez

tiende a moverse hacia el centro debido a la existencia de vórtices de velocidad en el movimiento de las partículas.

Finalmente se llegó a la conclusión que en el sistema sí hay convección como lo demuestra experimentalmente². La convección sucede gracias a la acción conjunta del movimiento y existencia de las paredes y la gravedad.

REFERENCIAS

- ¹DURAN, J., RAJCHENBACH, J., AND CLÉMENT, E. Arching effect model for particle size segregation. *Physical Review Letters* 70, 16 (1993), 2431–2434. Cited By :170.
- ²EHRICHS, E. E., JAEGER, H. M., KARCZMAR, G. S., KNIGHT, J. B., KUPERMAN, V. Y., AND NAGEL, S. R. Granular convection observed by magnetic resonance imaging. *Science* 267, 5204 (1995), 1632–1634. Cited By :182.
- ³JULLIEN, R., MEAKIN, P., AND PAVLOVITCH, A. Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking. *Physical Review Letters* 69, 4 (1992), 640–643. Cited By :192.
- ⁴KNIGHT, J. B., JAEGER, H. M., AND NAGEL, S. R. Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection. *Physical Review Letters* 70, 24 (1993), 3728–3731. Cited By :479.
- ⁵LIU, C., TONG, L., YIN, S., ZHANG, P., AND WANG, L. Size separation of binary mixture under vibration. In *AIP Conference Proceedings* (2013), vol. 1542, pp. 714–717.
- ⁶OQUENDO, W. *Micromechanical Statistical Study of the Critical State in Soil Mechanics*. PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia, 2013.
- ⁷ROSATO, A., STRANDBURG, K. J., PRINZ, F., AND SWENDSEN, R. H. Why the brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking. *Physical Review Letters* 58, 10 (1987), 1038–1040. Cited By :611.