



Modelo Tridimensional para la Simulación de la Dinámica Micro y Macro de Materiales Granulares

W. F. Oquendo y J. D. Muñoz

Grupo de Simulación de Sistemas Físicos, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 16 de Jun. 2008; Publicado en línea 25 de Jul. 2008

Resumen

En este trabajo presentamos un nuevo modelo para la simulación de medios granulares que puede aplicarse al estudio de diversos sistemas tales como suelos, arenas, pavimentos, compuestos superconductores en forma granular, y materiales relacionados. Este modelo incluye los resultados teóricos y experimentales más recientes del área. En este trabajo extendemos el modelo de rodadura a tres dimensiones, a cuerpos deformables, y añadimos un modelo de fuerza de fricción estática local. El número de parámetros mecánicos ha sido reducido al mínimo y en lo posible a parámetros accesibles al experimento, para facilitar la calibración de las simulaciones con resultados experimentales. La evolución de la orientación de los cuerpos se sigue aplicando la técnica de cuaterniones. Se muestran algunos resultados básicos del modelo, como la reproducción fiel de las etapas de fricción cinética y de rodadura en un movimiento tipo retro de billar en tres dimensiones. La extensión de este modelo para incluir otro tipo de fuerzas es trivial. También se han refinado algunas deficiencias, muy extendidas en el mundo, que se aplican para simular la interacción entre granos. Este modelo servirá como base para subsiguientes estudios de diversos materiales y en especial para continuar con la tendencia actual de conectar la microdinámica de un material granular y su respuesta macroscópica.

Palabras Clave: Física Computacional, Dinámica Molecular, Medios Granulares

Abstract

In this work we present a new model for granular media simulation that can be applied to the investigation of diverse system such soils, sands, pavements, superconductor compounds in granular form, and related materials. This model includes the most recent theoretical and experimental results of this research area. In this work we extend the rolling model to three dimensions, to deformable bodies, and we add to it a model for static local friction force. The amount of mechanical parameters has been reduced to a minimum and if possible to parameters easily accessible through experiments, in order to calibrate the simulation with experimental results. The evolution of the body orientations is reproduced by using the quaternion technique. Some basic results of the model are showed, for instance, a fine reproduction of the kinetic and rolling friction stages in a billiard movement on three dimensions. The extension of this model in order to include new forces is easy. Some definitions that have been used to simulate the grains interactions have been refined. This model will serve as a starting point of future studies of different materials and specially to continue the current trend of connect the microdynamics of the granular material with its macroscopic response.

Keywords: Computational Physics, Molecular Dynamics, Granular Media

1. Introducción

Un medio granular se define como un conjunto de partículas de difentes tamaños, formas y rugosidades. Esta definición tan general muestra que muchos materiales de la vida cotidiana se pueden considerar medios granulares. Ejemplos son el azúcar, la sal, los suelos, la arena, las píldoras farmacéuticas y los sistemas de asteroides, entre muchos otros. Comprender la compleja dinámica de los medios granulares se ha convertido en un objetivo importante tanto científico como industrial. Actualmente unos de los esfuerzos más importantes para entender los medios granulares se basa en trata de conectar la respuesta global del material granular con la microdinámica características de los granos constituyentes [1].

En este trabajo mostraremos un modelo para la microdinámica de un medio granular y una de las curvas de respuesta macroscópica que se puede obtener a partir de este modelo, la llamada curva de relación de vacíos, que mide el nivel de empaquetamiento del material y es una curva característica de la teoría hipoplástica [2]. Presentaremos los resultados del modelo al simular fricción cinética y de rodadura en un movimiento tipo retro de billar, y una curva de relación de vacíos que reproduce cualitativamente el comportamiento experimental.

2. Modelo y Resultados

El modelo es un sistema de partículas esféricas tridimensionales contenidas en un recipiente cilíndrico, que evoluciona por Dinámica Molecular, integrando las variables de traslación por métodos simpléticos [3] y las de orientación por Leap-frog y cuaterniones [4]. En lo que sigue se presentará el modelo de fuerzas micromecánicas, es decir, las fuerzas entre los granos. Se aplican las definiciones usuales: \vec{r}_i , \vec{v}_i , $\vec{\omega}_i$ y R_i denotan la posición, velocidad traslacional, velocidad angular y radio de la partícula i . La distancia de interpenetración entre dos partículas se calcula como $h_{ij} = R_i + R_j - |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. Un plano se considera una partícula de radio infinito.

Fuerzas Normales (Hertz + Amortiguamiento): La fuerza de Hertz se ha aplicado exitosamente para simular materiales granulares de diversas composiciones [5], mientras que la fuerza normal de amortiguamiento debe tener la forma mostrada abajo para reproducir correctamente resultados experimentales. La fuerza normal total está dada por

$$\vec{F}^n = \vec{F}^H + \vec{F}_{DAMP} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \frac{V_i V_j}{V_i + V_j} h_{ij}^{3/2} \hat{n}_{ij} - m_{ij} \sqrt{h_{ij}} \gamma_n \vec{v}_{ij}^n, \quad (1)$$

donde $V_{i(j)}$ es el coeficiente de rigidez de la partícula $i(j)$ y es igual a $V_i = E_{i(j)} / (1 - \nu_{i(j)}^2)$ donde $E_{i(j)}$ es el módulo de Young y $\nu_{i(j)}$ es el módulo de Poisson. Además, m_{ij} es la masa reducida y γ_n es una constante de amortiguamiento en la dirección normal.

Torque normal: Hemos redefinido la forma usual de este torque [5], calculándolo como la contribución neta disipativa sobre la superficie de contacto:

$$\vec{\tau}_{ij}^{tor} = -4\pi\gamma_n m_{ij} h_{ij} R_{ij} \vec{\omega}_{ij}^n, \quad (2)$$

donde γ_n es una constante de amortiguamiento normal.

Fuerza de rozamiento en deslizamiento y torque: Están definidos en la forma usual

$$\vec{F}_{DYN}^t = -\vec{F}_{DYN}^n \hat{t}_{ij} = -\mu_k |\vec{F}^n| \hat{t}_{ij}, \quad (3)$$

$$\vec{\tau}_{ij} = -R'_i \hat{n}_{ij} \times \vec{F}_{DYN}^t, \quad (4)$$

donde μ_k es el coeficiente de rozamiento dinámico, $|\vec{F}^n|$ es la magnitud de la fuerza normal que ejerce la partícula j sobre la partícula i y se ha usado el radio modificado $R' = R - h_{ij}$.

Fuerza de rozamiento en rodadura y torque: En este caso usaremos el modelo de rodadura y lo extendemos para incluir el caso de dos cuerpos deformables. Al desarrollar el modelo se obtiene

$$\vec{F}_{ROL}^t = -\frac{m_i R_i'^2 |\vec{F}^n| \tan \theta_r}{I + m_i R_i'^2} = \frac{|\vec{F}^n| \tan \theta_r}{1 + I/m_i R_i'^2} \hat{t}_{ij}, \quad (5)$$

$$\vec{\tau}_{ij} = \frac{I |\vec{F}^t|}{m_i R_i'} \hat{t}_{ij} \times \hat{n}_{ij} = \frac{I R_i' |\vec{F}^n| \tan \theta_r}{I + m_i R_i'^2} \hat{t}_{ij} \times \hat{n}_{ij} \quad (6)$$

donde I es el momento de inercia y θ_r es el ángulo de rodadura.

Fuerza de rozamiento estático: Definiendo el vector tangente como $\hat{t}_{ij} = \frac{\vec{F}^t}{|\vec{F}^t|}$, la fuerza de rozamiento estático se calcula como

$$\vec{f}_{ij}^t = -\vec{F}^t, \text{ si } |\vec{F}^t| < \mu_s |\vec{F}_{ij}^n|, \quad (7)$$

donde μ_s es el coeficiente de rozamiento estático.

Fuerzas externas: Como fuerza externa se considerará únicamente la fuerza de gravedad.

El modelo definido reproduce fielmente las etapas de deslizamiento y rodadura para una esfera que rueda sobre un plano horizontal. Las condiciones iniciales son tales que se reproduce el llamado efecto "retro" de billar. La Figura 1 muestra la velocidad lineal y angular como función del tiempo.

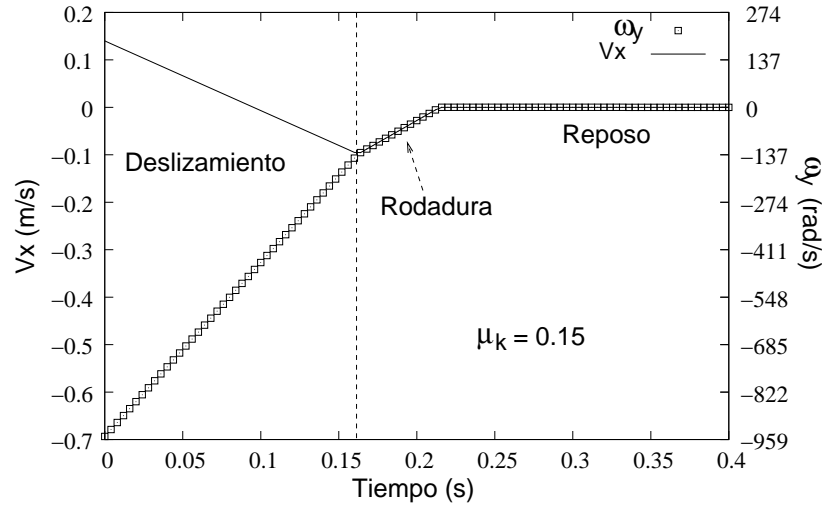


Figura 1. Velocidad lineal y angular para un retro de billar. La partícula se encuentra en la posición de equilibrio en el eje z . Los resultados de la simulación caen totalmente sobre los teóricos, los cuales quedan cubiertos.

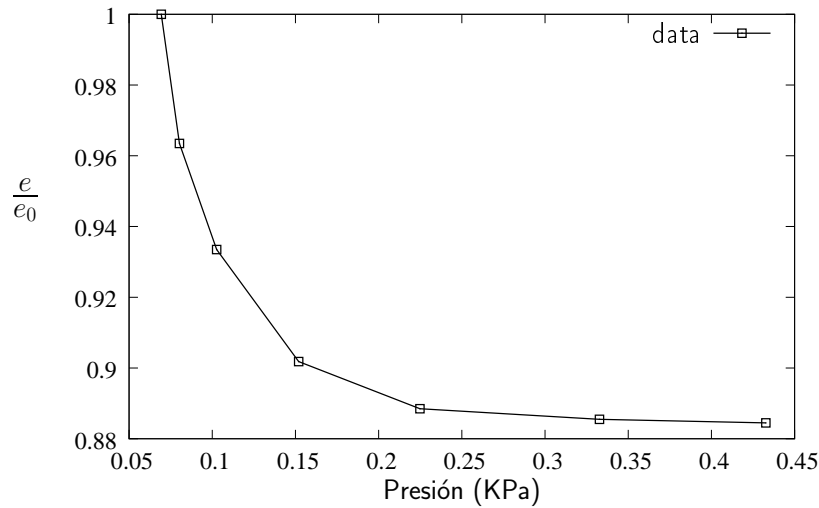


Figura 2. Curva de relación de vacíos para 600 partículas. El decaimiento de forma exponencial es típico de estas curvas en el experimento.

La Figura 2 muestra una curva de relación de vacíos obtenida para 600 partículas monodispersas (la polidispersidad no mostró grandes diferencias). Esta curva reproduce muy bien cualitativamente los comportamientos experimentales de muestras de arena y el descrito por la ecuación de Bauer de la hipoplasticidad [2].

3. Conclusiones

Hemos definido e implementado exitosamente un modelo para la simulación de materiales granulares de diferentes materiales, que reproduce fielmente los procesos de deslizamiento y rodadura, además de la relación de vacíos (de forma cualitativa). Este mod-

elo extiende el modelo de rodadura para medios deformables, y presenta una forma sencilla de implementar la fricción estática. Es muy sencillo añadir nuevas fuerzas en el modelo. Los parámetros de las fuerzas son accesibles al experimento y permiten una calibración entre la simulación y el experimento con materiales reales.

Este modelo es fácilmente extendible a diversos materiales y a varios grados de polidispersidad. Como una aplicación importante es posible reproducir y comparar cuantitativamente una curva de relación de vacíos con las ecuaciones de la hipoplasticidad y en especial con la llamada ecuación de Bauer, lo que permitiría obtener el valor de dos parámetros hipoplásticos del material, y tratar de explorar así la dependencia de estos

parámetros globales con respecto a los parámetros micromecánicos como el coeficiente de amortiguamiento en dirección normal γ_n o el coeficiente de rozamiento. Esperamos que este modelo sirva como punto inicial para futuros estudios de medios granulares y especialmente para continuar con la importante tendencia de justificar las teorías macroscópicas por medio de interacciones micromecánicas.

Referencias

[1] *Powders and grains: Proceedings of the 5th International*

Conference on Micromechanics of Granular Media, Stuttgart, Germany, July 2005.

- [2] G. Gudehus. A comprehensive constitutive equation for granular materials. *Soils and Foundations*, 36(1):1–12, 1996.
- [3] D. Frenkel and B. Smith. *Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications*. Academic Press, second edition, 2002.
- [4] Igor P. Omelyan. Algorithm for numerical integration of the rigid-body equations of motion. *Phys. Rev. E*, 58(1):1169–1172, Jul 1998.
- [5] S. Luding. Cohesive, frictional powders: contact models for tension. Submitted to *Granular Matter*, Dec 2006.