



Universidad Nacional de La Plata
Facultad de Ciencias Exactas
Departamento de Física

Tesis presentada para optar al grado de
Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas

Variables de estado en
la descripción estadística
de empaquetamientos granulares estáticos.
Dependencia con el tamaño del sistema.

Paula Alejandra Gago

Director:

Luis Ariel Pugnaloni

Asesor científico:

Prof. Dr. Ezequiel Vicente Albano

Tesis Doctoral
Realizada en el
Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos
y en el
Departamento de Ingeniería Mecánica de la
Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional La Plata
para obtener el Título de
Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de La Plata

Variables de estado en
la descripción estadística
de empaquetamientos granulares estáticos.
Dependencia con el tamaño del sistema.

por
Paula Alejandra Gago

Director:
Luis Ariel Pugnaloni

Asesor científico:
Prof. Dr. Ezequiel Vicente Albano

Sostenida el 15 de julio de 2014
Frente al jurado de Tesis conformado por:
María Alejandra Aguirre
Diego Maza Ozcoidi
Rodolfo Alberto Borzi

a
mi familia

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer el apoyo brindado por el CONICET para la realización de la presente tesis.

Agradezco también al Grupo de Materiales Granulares de la Universidad de Navarra por recibirmee en su laboratorio y en especial a Diego Maza por las fructíferas discusiones con que ha aportado a este trabajo.

Al proyecto de colaboración internacional CONICET-CNRS por permitirme visitar el Laboratorio de Física de la Ecole Normale Supérieure de Lyon y a Jean Christophe Géminard por recibirmee.

Al programa IUPAP/UNESCO "Women in Physics Travel Grant Program" por financiar mi asistencia al "SFB TR6 physics of colloidal dispersion in external fields".

PREFACIO

Los materiales granulares se definen como sistemas compuestos de un gran número de partículas macroscópicas que interactúan entre sí de forma disipativa. Al ser sistemas disipativos alcanzan rápidamente el equilibrio mecánico y permanecen en él a menos que se les entregue energía mediante alguna perturbación externa. Tienen la propiedad de permanecer mecánicamente estables en un amplio rango de configuraciones, y estas configuraciones pueden presentar diferentes valores de densidad, estrés, etc.

Se ha demostrado que aplicando repetitivamente perturbaciones discretas a un sistema granular confinado en una celda o recipiente, y dejando que el sistema retorne al equilibrio mecánico entre perturbaciones sucesivas, las propiedades correspondientes a cada configuración estática del mismo evolucionan hasta alcanzar un régimen estacionario, con valores medios y fluctuaciones bien definidos. Se ha mostrado también que los valores alcanzados por estas propiedades en el régimen estacionario no dependen de la historia previa que hayan recorrido en el espacio de variables macroscópicas del sistema, sino que resultan determinadas a partir de las características de la perturbación aplicada.

La posibilidad de generar estados estacionarios en las configuraciones estáticas de los materiales granulares ha despertado gran interés en distintos grupos de investigación alrededor del mundo. Estos enfocan sus esfuerzos en intentar establecer un marco teórico que permita describir el estado macroscópico de los sistemas granulares a partir de unos pocos parámetros. La propuesta más discutida en la actualidad se basa en la utilización de herramientas de la mecánica estadística y es conocida como la mecánica estadística granular de Edwards. Para llevar adelante este tipo de propuestas resulta indispensable establecer primero bajo qué condiciones es posible reproducir el estado macroscópico de un sistema granular.

Mi trabajo de tesis se enfoca en el estudio de la reproducibilidad de las propiedades macroscópicas estructurales y mecánicas de estos materiales en el estado estacionario. Para esto he estudiado la dependencia de estas propiedades con el tamaño del sistema. Este estudio resulta de interés debido a que todos los trabajos existentes en el área, experimentales y numéricos, no obtienen un acuerdo cuantitativo

en los resultados, aunque muestren acuerdo en gran parte de su comportamiento cualitativo.

La hipótesis central de esta tesis es que el tamaño de la muestra bajo estudio tiene un efecto significativo no trivial en los valores medios y fluctuaciones de cantidades macroscópicas, como la fracción de volumen ocupado y el estrés. El objetivo de esta tesis es entonces elucidar bajo qué condiciones es posible reproducir cuantitativamente resultados obtenidos en experimentos independientes, donde se producen estados estacionarios de configuraciones estáticas con diferentes tamaños de sistemas.

Como resultado de este trabajo implementamos un protocolo de medición, sobre regiones específicas del sistema. Con la implementación de este protocolo, seremos capaces de obtener resultados comparables entre sistemas de diferentes tamaños. A partir de esto, encontramos que es posible definir un parámetro que, caracterizando el efecto que la perturbación aplicada induce sobre el sistema, permite predecir el valor alcanzado por la densidad en el estado estacionario. El parámetro propuesto resulta dependiente de la altura de la columna de granos del sistema y de las características propias de la perturbación. También encontramos que un parámetro similar podría ser definido para predecir el valor del estrés en el estado estacionario.

El aporte original de este trabajo reside en establecer los criterios para seleccionar la región donde llevar adelante la medida de las cantidades macroscópicas que caracterizan al sistema y definir los métodos que deben utilizarse para que resulte posible la comparación cuantitativa de resultados obtenidos en sistemas de diferentes tamaños.

ÍNDICE GENERAL

Prefacio	V
1. MATERIALES GRANULARES	1
1.1. Características generales	1
1.2. Cadenas de fuerzas, arcos y efecto Janssen	3
1.3. Fracción de volumen ocupado ϕ	5
1.4. Compactación por golpes	6
1.5. Termodinámica granular	8
1.6. Estructura de esta tesis y aporte original	9
2. MARCO TEÓRICO	13
2.1. Mecánica estadística	13
2.2. Mecánica estadística granular	15
2.3. Estados estacionarios de equilibrio mecánico en granulares	17
2.4. Variables de estado	19
2.5. Resumen del problema a resolver	21
3. SIMULACIÓN Y MÉTODOS DE ANÁLISIS	23
3.1. Simulación por elementos discretos de esferas blandas con fricción	23
3.2. Generación de configuraciones de equilibrio mecánico	26
3.2.1. Pulsos armónicos	26
3.2.2. Expansión homogénea	27
3.3. Implementación y sistema bajo estudio	28
3.4. Métodos de análisis	30
3.4.1. Medidas de ϕ y áreas de Voronoi	30
3.4.2. Tensor de esfuerzos	31
3.4.3. Valores medios y fluctuaciones	32
4. CONSIDERACIONES Y RESULTADOS PRELIMINARES	35
4.1. Confinamiento vs. dimensionalidad	35
4.2. Región de análisis	37
4.3. Ruptura de ergodicidad	40
4.4. Recapitulación	41
5. RESULTADOS: EFECTOS DEL TAMAÑO DEL SISTEMA	43
5.1. Tamaños de sistemas analizados	43

Índice general

5.2. Fracción de volumen ocupado	45
5.3. Comparación con experimentos $3D$	47
5.4. Fluctuaciones de ϕ	49
5.5. Tensor de esfuerzos	52
5.6. Espacio de fases “termodinámico”	57
6. CONCLUSIONES	61
6.1. Sumario	61
6.2. Perspectivas	63
6.3. Comentarios finales	64
Apéndices	
A. LAMMPS	67
B. FLUCTUACIONES DE DENSIDAD Y CRISTALIZACIÓN	71
Bibliografía	73

1

MATERIALES GRANULARES

Desde la materia bruta utilizada en la construcción (arena, cal, rocas, etc), pasando por las nubes de polvo y rocas que son despedidos en erupciones volcánicas o forman los anillos planetarios, hasta los clásicos azúcar, pimienta y sal, los materiales granulares nos rodean por doquier.

Estos materiales presentan propiedades particulares que los diferencian de otros tipos de materiales y han sido estudiados por científicos desde hace mucho tiempo atrás [1–3]. Sin embargo, la investigación sistemática de sus propiedades se realiza desde hace menos de un siglo, impulsada en sus inicios principalmente en el área de la ingeniería [4] debido a la amplia utilización de granulares en los procesos industriales¹. En los últimos años, se han convertido en el tema de investigación de un número cada vez mayor de científicos alrededor del mundo.

En este capítulo discutiremos primero sobre algunas de las características distintivas de los materiales granulados. Luego, introduciremos propiedades y definiciones específicas relacionados con el presente trabajo y concluiremos el capítulo con los objetivos y el aporte original de esta tesis.

1.1 CARACTERÍSTICAS GENERALES

Un material o medio granular se define como un conjunto numeroso de partículas macroscópicas (granos) que interactúan entre sí de forma disipativa. Esta definición implica que las propiedades de interés son las del conjunto de sus partículas componentes, y que su manipulación se refiere siempre a la excitación colectiva de sus componentes, no a la manipulación de cada grano en forma individual. Dada la complejidad de las interacciones grano-grano, estos sistemas muestran fenómenos muy diversos, propios de la física de materia blanda y sistemas complejos. Algunos fenómenos recurrentes son: envejecimiento, heterogeneidades dinámicas [5], ruptura de ergodicidad [6] y segregación [7].

Considerando como partículas a los granos macroscópicos y no a los átomos que los conforman, la energía térmica de una partícula (proporcional a $k_B T$ donde T es la temperatura y k_B la constante de Boltzman) resulta despreciable en comparación con su peso. Es por esto que una vez que haya alcanzado el equilibrio mecánico, una partícula permanecerá en esta configuración mientras no sea perturbada de forma externa. Por esta propiedad los materiales granulares son llamados materiales atérmicos. Se ha demostrado [8], sin embargo, que variaciones en la temperatura T del sistema generan modificaciones de las tensiones existentes en los contactos entre partículas.

La presencia de interacciones disipativas hace que estos sistemas se encuentren generalmente en configuraciones estáticas y resulta necesario aplicar perturbaciones externas para modificar estas

¹ Son de hecho la forma de manipulación de materiales más utilizada en el mundo, luego del agua.

configuraciones. Por la complejidad que imponen las fuerzas de rozamiento estático, el estado final de equilibrio mecánico alcanzado no puede ser especificado sólo mediante el conocimiento de las posiciones de sus partículas. Es necesario saber la historia del sistema, es decir, los procesos de manipulación aplicados. Esto introduce complejidad en el sistema, comportamientos no lineales e histéresis [9].

Otra característica importante de mencionar es que el número de partículas que componen estos sistemas, por muy grande que puedan resultar, siempre será órdenes de magnitud menor que el número de partículas que componen los sistemas termodinámicos². Más aún, si tomamos en consideración que el estudio de las propiedades de estos sistemas se realiza generalmente sobre muestras en un laboratorio o en simulaciones numéricas, el número de granos considerados resulta todavía menor. Esto hace que no sea simple definir un límite para el tamaño de los sistemas granulares a partir del cual resulte posible garantizar que las propiedades medidas sobre un sistema de tamaño determinado sean comparables con las medidas realizadas sobre sistemas de diferente tamaño.

Suele decirse que los materiales granulares constituyen un nuevo estado de agregación de la materia ya que presentan, dependiendo de las características del entorno en que se encuentre, comportamientos completamente diferenciables. Pueden, al encontrarse confinados en un recipiente de paredes rígidas, presentar propiedades características de los sólidos, como la de soportar esfuerzos y mantener su forma aún al ser sometido a tensiones. El ejemplo más claro en relación a este comportamiento puede verse en la arena que se encuentra en las playas, y en su capacidad de soportar el peso de quienes caminan sobre ella. Estos materiales también pueden presentar comportamientos fluidos. Estos comportamientos son consecuencia de someter al sistema a perturbaciones continuas, ya sea por acción de la gravedad, como sucede en las descargas de silos o en las avalanchas, o sometiendo al sistema a vibraciones mecánicas. Por último, es posible encontrar a estos materiales en configuraciones llamadas gaseosas, cuando la intensidad de la perturbación que se les aplica supera en mucho el efecto de la gravedad, en el caso de las tormentas de arena, o incluso, cuando el efecto de la gravedad se vuelve menos relevante, como en el caso de las nubes de rocas y polvos que componen los anillos de Júpiter o las colas de los cometas.

Por lo expuesto anteriormente es que estos materiales presentan comportamientos particulares que suelen resultar no intuitivos y sorprendentes. Un ejemplo es el fenómeno de segregación [7].

Si se perturba a un sistema granular compuesto de una mezcla de partículas de diferentes características (ya sea densidad, tamaño, coeficiente de fricción, etc.) de forma fluidizante (como dijimos antes, esto puede hacerse aplicando vibraciones continuas, o dejando al material fluir por la acción de la gravedad) los distintos componentes del sistema tienden a separarse, formando fases con diferentes concentraciones relativas (Fig. 1).

En la foto de la izquierda de la Fig. 1 puede verse un patrón típico que se forma al construir una pila de arena usando dos tipos diferentes de tamaño de granos. Este tipo de patrón se produce debido a que el ángulo de inclinación que adquieren las pilas (dado por el ángulo de avalancha) es característico del material con que se forma. Al construir una pila a partir de una mezcla de partículas con ángulos de avalancha diferentes, se producen avalanchas a distintas inclinaciones, formando un patrón de líneas inclinadas intercaladas. En la foto derecha de la misma figura podemos ver el mismo efecto, pero producido dentro de un tambor estrecho que gira a una velocidad angular constante. La diferencia entre los ángulos de avalancha de los distintos tamaños de grano forma aquí un

² Un silo de campaña contiene del orden de 10^{10} granos de cereal mientras que una muestra de cualquier material contiene del orden de 10^{23} átomos.

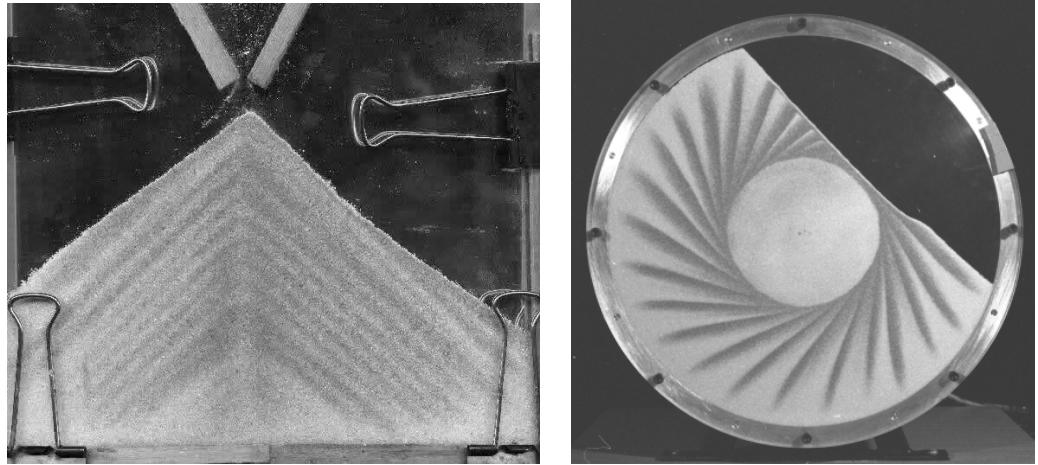


Figura 1.: Patrones típicos hallados en segregación granular. (a) Pila de arena (imagen extraída de [10]). (b) Tambor rotante (imagen extraída de [11]). Ambas imágenes corresponden a una mezcla de partículas de dos tamaños que pueden distinguirse por color.

patrón típico con forma de pétalos. El número de estos pétalos depende de la velocidad de rotación del sistema [12].

1.2 CADENAS DE FUERZAS, ARCOS Y EFECTO JANSSEN

En esta sección explicaremos algunos efectos particulares que se pueden observar en el comportamiento de los materiales granulares e introduciremos definiciones que utilizaremos luego a lo largo de la tesis.

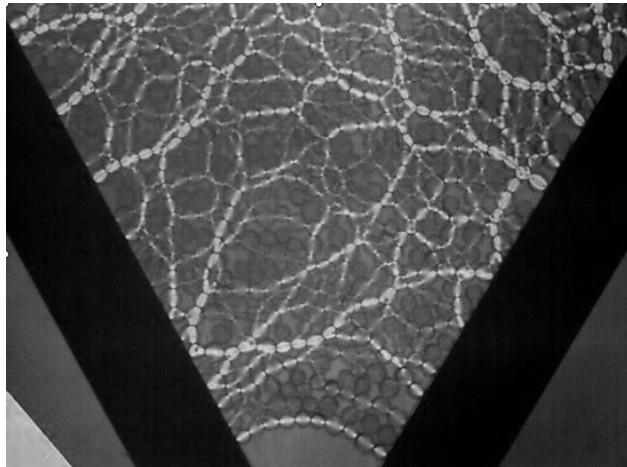


Figura 2.: Sistema granular bidimensional compuesto de partículas fotoelásticas en el interior de una tolva, colocada entre dos polarizadores cruzados (imagen extraída de [11]). Las regiones iluminadas representan las partículas con mayor tensión. Se ve que los esfuerzos se distribuyen de forma no homogénea. Este tipo de distribución de esfuerzos es llamado cadenas de fuerzas.

Se llama cadena de fuerzas [13] a los patrones que toma la distribución de esfuerzos en el interior de un material granular (Fig. 2). Los esfuerzos en estos materiales no se distribuyen de forma uniforme, sino que se propagan a través de los contactos presentes en el sistema y, dependiendo

de la historia en que estos fueron creados, no todos los contactos resultan igual de tensionados. Es por eso que se generan patrones en forma de red, que muestran cadenas de partículas fuertemente tensionadas y ramificaciones. También pueden verse partículas que, aún teniendo gran cantidad de material granular sobre ellas, no soportan ningún esfuerzo significativo.

En el interior de un granular en equilibrio mecánico existen estructuras de partículas mutuamente sustentadas, denominadas arcos (Fig. 3).

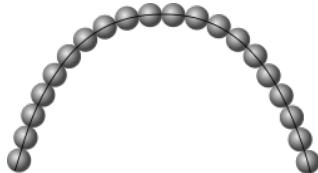


Figura 3.: Representación esquemática de un arco. Por definición, las partículas que componen un arco se encuentran mutuamente sustentadas, por lo que el arco colapsa al remover cualquiera de ellas.

Los arcos pueden estar formados por distinto número de partículas. Se ha visto [14] que el volumen de un sistema granular está relacionado con la distribución de tamaños que presentan estos arcos en la configuración estudiada.

La formación de arcos en la proximidad del orificio de salida de los silos o tolvas, es la responsable de los atascos que se producen en el sistema, y que detienen el flujo de partículas. Un ejemplo de este tipo de arcos puede verse también en la Fig. 2.

Cabe remarcar que si bien se ha encontrado una correlación entre arcos y cadenas de fuerzas [15], no existe una correspondencia uno a uno entre estos dos tipos de estructuras.

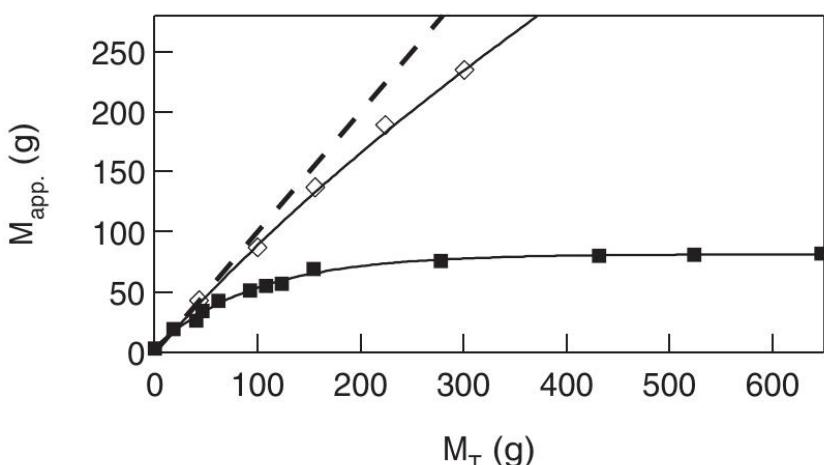


Figura 4.: Efecto Janssen. Puede verse, en función de la masa total M_T contenida en el silo, el valor de la masa aparente M_{app} , calculada a partir del valor de la presión ejercida sobre la base. Los cuadrados llenos muestran la masa aparente que soporta la base del silo cuando se realiza una movilización total entre las paredes del silo y los granos. Los rombos vacíos indican la masa aparente medida en un sistema en que sólo se realizó una movilización parcial. Puede verse que en el primer caso las paredes soportan la mayor parte del peso del sistema, mientras que en el segundo caso una gran parte del peso descansa en la base. En línea de trazos se indica el comportamiento que correspondería a un sistema fluido. Este gráfico fue extraído de [16].

El efecto Janssen [17] es el fenómeno por el cuál la presión ejercida sobre la base de un silo que contiene granos no crece de forma proporcional a la altura de la columna de materia que soporta (como sí sucede con los tanques de agua) sino que alcanza un valor de saturación. Este valor depende entre otras cosas del ancho del silo.

El valor de saturación que alcanza la presión en el efecto Janssen depende también del movimiento relativo entre las partículas y las paredes del silo que sucede cuando el sistema alcanza el equilibrio. Hemos mostrado por ejemplo [16], que al llenar un silo dejando caer material granular en su interior, la presión que se ejerce sobre la base resulta levemente menor que la que ejercería el peso real del sistema. Pero si una vez alcanzado el equilibrio mecánico, se moviliza el sistema, elevando por ejemplo, poco a poco las paredes del silo (en este experimento la base del silo se encontraba desconectada de las paredes laterales), puede alcanzarse un límite en que la presión que siente la base satura en la forma que describe Janssen. Esto puede verse en la Fig. 4. Este comportamiento también ha sido reportado en el trabajo [18]. Este fenómeno resulta importante en el diseño y construcción de silos y tolvas.

1.3 FRACCIÓN DE VOLUMEN OCUPADO ϕ

La fracción de volumen ocupado, fracción de empaquetamiento o compacidad ϕ de un sistema granular está definida como

$$\phi = \frac{vol_{real}}{vol_{aparente}}, \quad (1)$$

donde vol_{real} es igual a la suma de los volúmenes de cada partícula en el sistema, mientras que $vol_{aparente}$ es el volumen total que el sistema ocupa como un todo, incluidos los espacios vacíos que se forman entre los granos. Este parámetro es una medida de la densidad del sistema, está relacionada con el volumen V , pero, al ser intensivo, resulta comparable entre sistemas diferentes. Sin embargo, como comentaremos en el Cap. 3, la medición de ϕ (fundamentalmente en sistemas tridimensionales) no resulta un trabajo sencillo.

La introducción del parámetro ϕ resulta importante porque se ha demostrado [19] que, bajo determinadas formas de manipulación del sistema, este parámetro resulta reproducible. Comentaremos esto en la sección siguiente.

Como puede verse en la Fig. 5, ϕ de un mismo sistema puede tomar diferentes valores dependiendo de la posición de sus partículas. Esta figura muestra un mismo sistema granular, confinado en una celda bidimensional y consistente de 2000 partículas circulares, en dos configuraciones “microscópicas” diferentes, que resultan en distinto valor de ϕ .

Como dijimos antes, la variación del volumen ocupado por el sistema, y por lo tanto de ϕ , está relacionada con la distribución de tamaños de arcos en el mismo [14]. Existen discusiones abiertas acerca de los límites que ϕ puede alcanzar en sistemas desordenados. Los límites mayor y menor que esta magnitud puede tomar son llamados *Random Close Packing* (*RCP*) y *Random Loose Packing* (*RLP*) respectivamente. En la tabla 1 se muestran los valores más aceptados [20] de estos límites para partículas monodispersas, esféricas (3D) y circulares (2D).

Para valores de ϕ mayores al *RCP* suele decirse que el sistema presenta regiones cristalizadas. Se ha visto en algunos casos que sistemas monodispersos (con mayor frecuencia en sistemas bidimensionales) pueden presentar cristalización si se los perturba de forma suave. Dos formas de evitar este efecto consisten en: (1) utilizar celdas contenedoras de dimensiones no commensurables con el diámetro de las partículas y (2) la introducción de polidispersidad en el tamaño de los granos.

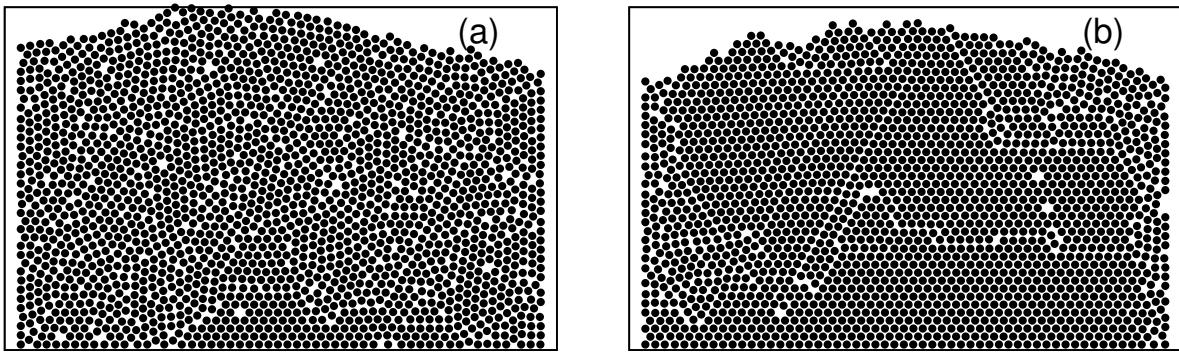


Figura 5.: Foto de dos configuraciones “microscópicas” diferentes de las partículas de un mismo sistema confinado en una celda bidimensional que resultan en distinto valor de su fracción de empaquetamiento ϕ . (a) $\phi \approx 0,798$. (b) $\phi \approx 0,822$.

	<i>RCP</i>	<i>RLP</i>
2D	0.82	0.775
3D	0.64	0.6

Tabla 1.: Valores límites Random Close Packing (*RCP*) y Random Loose Packing (*RLP*) de ϕ para esferas y discos de tamaños monodispersos, extraídos de la Ref. [20].

Es importante destacar que el concepto mismo de *RCP* presenta controversias. En particular, Torquato et al. [21] argumentan que es imposible definir tal estado y proponen un estado de referencia nuevo, al que llaman *Maximally random jammed state*, que puede ser definido de forma precisa.

1.4 COMPACTACIÓN POR GOLPES

Es sabido que al aplicar golpes sobre un sistema granular confinado es posible cambiar el volumen V que este ocupa. Esto podemos verlo cuando llenamos saleros o azucareras y golpeamos el recipiente para poder introducir en el mismo más sal o azúcar. Al golpear de forma muy suave es posible conseguir que el sistema alcance mayores densidades. Se ha estudiado [19, 22] que la forma en que la densidad evoluciona al aplicar los golpes sigue una función del tipo logarítmica con el número de golpes aplicados. Esto hace que el régimen estacionario (donde la densidad del sistema deja de evolucionar al seguir aplicando golpes) resulte prácticamente inalcanzable. En el año 1997, sin embargo, se introdujo un protocolo de perturbación [19] mediante la implementación de un “recocido” (*annealing*), que permitía disminuir el tiempo que requería al sistema alcanzar un estado estacionario. Este trabajo es la base de muchos trabajos posteriores, y es conocido como “El experimento de Chicago”.

El Experimento de Chicago consistió en la aplicación de golpes suaves a un sistema granular compuesto por esferas de vidrio monodispersas de diámetro d , confinadas dentro de un tubo cilíndrico angosto de diámetro D ($D \sim 10d$). La altura de la columna de material era de aproximadamente $400d$. El protocolo de recocido implementado consistió en recorrer una rampa creciente de intensidades de perturbación (donde cada amplitud era levemente superior a la amplitud precedente), aplicando con cada intensidad del orden de 10^5 golpes al sistema, y registrando el valor final de ϕ .

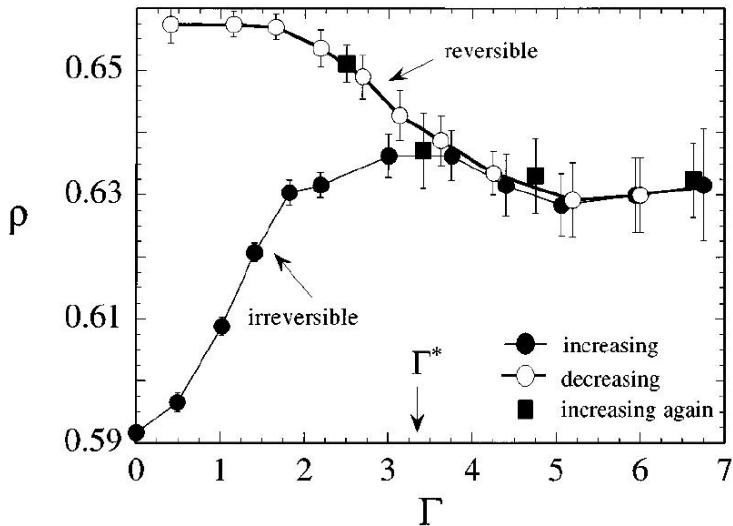


Figura 6.: ρ (aquí ρ se utiliza de forma equivalente a ϕ) como función de Γ obtenidos en el Experimento de Chicago [19]. El protocolo de recocido se realizó siguiendo primero una rampa creciente de valores Γ (círculos llenos), luego una rampa decreciente (círculos vacíos) y finalmente una rampa nuevamente creciente (cuadrados llenos). Puede verse que luego de transitar un conjunto de estados irreversibles (rama irreversible) el sistema permanece en el régimen reversible, donde el valor de ϕ resulta dependiente únicamente del valor Γ de la perturbación aplicada, sin importar la historia del protocolo de perturbación. Gráfico extraído de [19].

antes de modificar la intensidad. Luego aplicaron la misma rampa de intensidades pero en sentido inverso (intensidades decrecientes). Repitieron esto varias veces, siempre sobre la misma muestra de granos. La intensidad del golpe aplicado fue caracterizada mediante la aceleración reducida Γ

$$\Gamma = a_{max}/g \quad (2)$$

donde a_{max} es la aceleración máxima alcanzada por el sistema durante la perturbación y g es la aceleración de la gravedad. Lo que encuentran estos autores es que al incrementar el valor de Γ el valor final alcanzado por ϕ resulta cada vez mayor, hasta un valor de intensidad Γ^* , a partir del cual ϕ se vuelve decreciente (ver Fig. 6). Al recorrer los valores de Γ en sentido inverso, observan que ϕ como función de Γ resulta ahora una función monótona decreciente, y ya no vuelve a tomar los valores alcanzados en la rampa creciente. Al repetir reiteradamente este protocolo (sobre el mismo sistema granular, sin vaciar el recipiente) comprueban que los valores de ϕ caen una y otra vez sobre la misma curva (que llamarán rama reversible), y quedan entonces determinados únicamente a partir del valor dado a Γ . Este resultado fue importante porque establece por un lado, que existen regímenes estacionarios reproducibles para ϕ (con valor medio y fluctuaciones bien definidas). Por otro lado, desarrolla un método por el cuál es posible hacer que el sistema atraviese los estados transitorios intermedios rápidamente, y acceda a estos estados estacionarios en un tiempo considerablemente menor que el que llevaría (si esto fuese posible) alcanzar estos estados mediante la aplicación de numerosos golpes con la misma intensidad.

El resultado obtenido en el Experimento de Chicago fue corroborado por diversos grupos [22–24] y durante mucho tiempo se consideró que la función ϕ era monótonamente decreciente con Γ . Esto implicaba, entre otras cosas, que el estado mecánico macroscópico del sistema quedaba determinado únicamente dando el valor de su volumen ocupado. Sin embargo, en el año 2008 se presentaron evidencias que complementaban este comportamiento y que mostraban que, al aumentar suficientemente Γ , ϕ alcanzaba un valor mínimo y se volvía luego una función creciente de

Γ. Este resultado fue obtenido primero en forma numérica, mediante la implementación de varios modelos granulares [14]. En el año 2010 pudimos verificarlo de forma experimental [25] sobre un sistema granular cuasi-bidimensional. En la Fig. 7 puede verse la rama reversible que resulta del experimento mencionado. Los triángulos naranjas (hacia arriba) corresponden a la aplicación de un protocolo de recocido similar al del experimento de Chicago (decreciendo desde altas amplitudes Γ) y los triángulos verdes (hacia abajo) corresponden a haber utilizado una configuración inicial ordenada distinta para cada Γ aplicado.

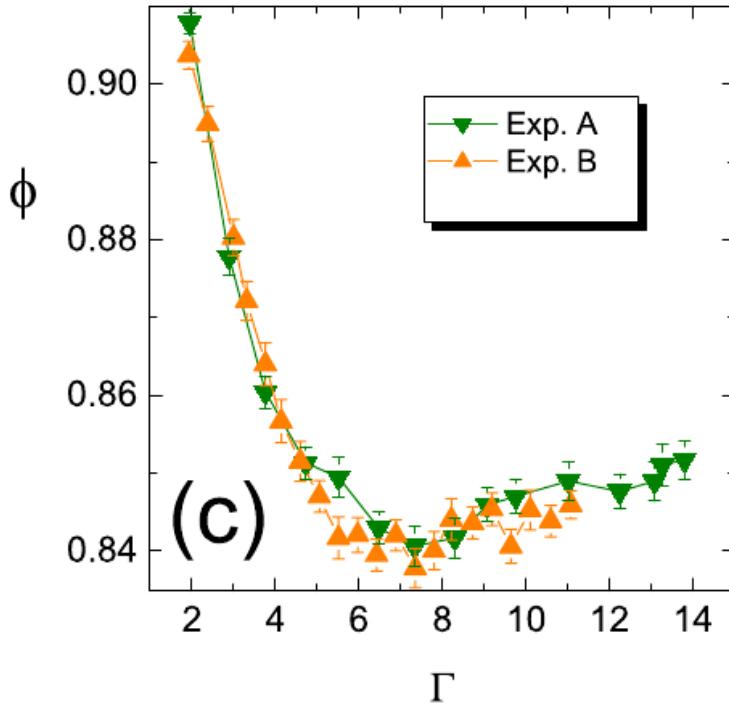


Figura 7.: Rama reversible de ϕ en el estado estacionario como función de Γ . Este resultado fue medido experimentalmente sobre un sistema cuasi bidimensional de partículas esféricas, la celda tenía un ancho L aproximado de 28 diámetros d de partículas y la altura aproximada del sistema correspondía a $35d$. Las diferentes curvas corresponden a distintas condiciones iniciales. Los triángulos naranjas hacia arriba corresponden a un protocolo de recocido con valores de Γ en una rampa decreciente. Los triángulos verdes hacia abajo corresponden a utilizar una configuración inicial diferente para cada Γ . Gráfico extraído de la Ref. [25].

Se demostró además [25, 26] que los estados correspondientes a un mismo valor de ϕ (a cada lado del mínimo) pero obtenidos mediante la aplicación de intensidades Γ diferentes, poseían características que los hacían diferenciables. Una de las características fundamentales resultó el tensor de esfuerzos Σ que, a diferencia de ϕ , mostraba un comportamiento monótonamente creciente con Γ . Este hecho abrió un nuevo panorama en el estudio de las propiedades de los estados estacionarios de equilibrio mecánico en los materiales granulares, y planteó la necesidad de encontrar nuevos parámetros que permitan definir únicamente estos estados a nivel macroscópico.

1.5 TERMODINÁMICA GRANULAR

Uno de los objetivos centrales buscados en el estudio de los sistemas granulares estáticos es establecer si resulta posible definir el estado mecánico del sistema a través de unas pocas variables

macroscópicas. El estado mecánico aquí no implica una única configuración estática (a la que llamaremos microestado o simplemente configuración) sino la colección de estas configuraciones que se suceden en el estado estacionario obtenido por la aplicación repetitiva de una perturbación externa. La determinación de estas variables macroscópicas resulta central para el desarrollo de una “termodinámica granular”. La existencia de estados estacionarios de ϕ que discutimos en la sección anterior hace pensar al volumen $V = Nv_g/\phi$ (donde v_g es el volumen de un grano y N el número de granos en el sistema) como un fuerte candidato a variable termodinámica extensiva. Sin embargo, el descubrimiento de estados que presentan el mismo ϕ pero pueden ser diferenciables a partir de otros parámetros macroscópicos [25, 26], muestra que esta variable no resulta suficiente.

Han sido propuestos diversos marcos teóricos para formalizar el estudio de estos materiales, algunos de los cuales han partido incluso del uso de herramientas de la teoría de la información [27]. La propuesta que ha tomado más relevancia en los últimos años, sin embargo, es el modelo propuesto en el año 1989 por Edwards y Oakeshott [28] en el que, partiendo de analogías entre los sistemas granulares y los sistemas estudiados por la mecánica estadística clásica (las cuales discutiremos en el capítulo siguiente), se propone la utilización de las herramientas matemáticas desarrolladas por esta última para avanzar hacia una mecánica estadística granular. Esta propuesta ha sido controvertida y ha servido de base para numerosos trabajos [29–33]; algunos de los cuales la apoyan, mientras que otros la cuestionan. Discutiremos las bases de este enfoque con más detalle en el capítulo siguiente (Cap. 2). Uno de los principales inconvenientes con que se encuentran actualmente este tipo de propuestas teóricas es la imposibilidad de comparar cuantitativamente resultados obtenidos en distintos laboratorios.

1.6 ESTRUCTURA DE ESTA TESIS Y APORTE ORIGINAL

Una premisa básica para el desarrollo de modelos y marcos teóricos con capacidad predictiva a nivel cuantitativo en física es la posibilidad de reproducir fielmente experimentos en forma independiente. Esto lleva implícito la definición precisa del sistema de estudio, de las condiciones en que debe realizarse el experimento y los detalles en la forma de medición. Cumplir con esta premisa es aún una materia pendiente en varias áreas la física de materiales granulares, en nuestro caso, en la generación de estados estacionarios de empaquetamientos granulares estáticos con excitaciones pulsadas.

Como comentamos en la sección 1.4, numerosos grupos de investigación han intentado reproducir el Experimento de Chicago realizando experimentos [24, 25, 34–36] y simulaciones numéricas [14, 23, 37–42]. Todos estos trabajos resultan cualitativamente consistentes, ya que obtienen la rama reversible de ϕ como función de la aceleración reducida del sistema Γ encontrada por Nowak et al. [19]. Sin embargo, los valores de ϕ reportados, y su correspondencia con Γ , varían de un trabajo a otro. En ningún estudio se han comparado en forma directa curvas obtenidas por diferentes grupos de investigación. En muchos casos el material granular utilizado (o el modelo numérico) es comparable al de otros grupos por lo que no se pueden atribuir las diferencias al uso de un material (o modelo) diferente. Algunos autores han propuesto para caracterizar la perturbación aplicada al sistema parámetros alternativos a Γ [35, 36] con el objetivo de reconciliar resultados obtenidos perturbando sistemas de igual tamaño, con pulsos de diferente duración. Sumado a esta inconsistencia cuantitativa entre los resultados de ϕ de experimentos independientes, se encuentra el hecho de que no existen demasiados trabajos que realicen mediciones sobre el tensor de esfuerzos Σ . Esto hace que sea difícil aún asegurar que experimentos independientes produzcan valores comparables de Σ , tanto cualitativa como cuantitativamente.

Nuestra hipótesis de trabajo es que las diferencias existentes entre los resultados obtenidos por diferentes laboratorios al intentar reproducir el experimento de Chicago son consecuencia de la diferencia de tamaños de los sistemas estudiados como así también de la forma de medición de ϕ y Σ . En general, estos aspectos son pasados por alto en muchos estudios y por lo tanto no se reproducen (ni se reportan) adecuadamente estas condiciones.

En sistemas atómicos, una muestra incluso pequeña del material (aunque no nanoscópica) asegura que el sistema contiene un número suficientemente grande de átomos ($\approx 10^{23}$) para despreciar los efectos de tamaño finito y de borde. En dichas condiciones se dice que el sistema cumple con el límite termodinámico. No existe actualmente una condición precisa sobre cuándo se cumple el “límite termodinámico” para sistemas granulares. Las muestras de laboratorio de materiales granulares son generalmente pequeñas (decenas de diámetros de granos).

Utilizaremos el método de compactación por golpes introducido en la Ref. [43] para generar estados estacionarios de configuraciones granulares estáticas. Nos enfocaremos en el régimen de amplitudes de perturbación donde la función ϕ vs. Γ fue reportada como no monótona [14].

Este trabajo será realizado con simulaciones numéricas. Utilizaremos un modelo de esferas blandas con roce que ha sido ampliamente probado por otros autores [44–46]. Detallaremos este modelo en el Cap. 3.

Mostraremos resultados que indican que el comportamiento no monótono de ϕ vs. Γ no se debe a un efecto del tamaño finito del sistema. Discutiremos sin embargo, en consonancia con otros trabajos (Refs. [35, 36]), que el parámetro Γ no resulta indicado a la hora de caracterizar la perturbación sobre el sistema. A diferencia de las propuestas de las Refs. [35, 36], argumentaremos que el tamaño del sistema, en particular la altura de la columna de granos, es una variable que debe ser incluida en la definición de cualquier parámetro alternativo. Propondremos, inspirados en la Ref. [14], una nueva variable (que llamaremos expansión efectiva ϵ), que da cuenta del efecto producido sobre el sistema por la perturbación. Este resulta dependiente tanto de las características de la perturbación como de las dimensiones del sistema sobre el que esta se aplica. Mostraremos que ϵ permite comparar resultados de experimentos independientes (con sistemas de tamaño diferente) y contiene como caso particular al parámetro propuesto en [35], cuando no se considera un cambio de tamaño en los sistemas analizados. Además, mostraremos que para reproducir valores de ϕ y sus fluctuaciones es necesario realizar las mediciones sobre sistemas suficientemente anchos y en regiones convenientemente elegidas.

Estados estacionarios que presentan igual ϕ obtenidos a partir de la aplicación de perturbaciones muy diferentes en intensidad resultan distinguibles al considerar el tensor de esfuerzos Σ como lo hemos mostrado en [25]. Investigamos aquí también el comportamiento de Σ en los distintos tamaños de sistemas estudiados. Encontraremos que esta variable resulta fuertemente dependiente de la altura del sistema y que para reproducir su valor en experimentos independientes es importante asegurar que las alturas de la columna de granos de las muestras sean comparables. Asimismo, destacaremos que para bajas amplitudes de perturbación Σ está fuertemente afectado por efectos de memoria en la interacción entre los granos. Aún cuando considerando mediciones de ϕ el estado parece estar bien definido, los efectos de memoria producen que el valor de Σ sea diferente en realizaciones independientes de las simulaciones. Este es un resultado importante debido a que la mayoría de los trabajos en el área se realizan sobre regímenes de bajas intensidades de golpe, estudiando el comportamiento de la variable ϕ , sin verificar la reproducibilidad de Σ .

El resto de esta tesis está estructurada de la siguiente manera. En el Cap. 2 discutiremos el marco teórico sobre el que se apoya la corriente principal de pensamiento en materiales granulares estáticos. Discutiremos controversias existentes en relación al comportamiento de las variables macroscópicas ϕ y Σ y sus fluctuaciones. En el Cap. 3 detallaremos las herramientas numéricas utilizadas. En

el Cap. 4 discutiremos algunos aspectos básicos sobre el comportamiento de los sistemas estudiados y mostraremos resultados preliminares que justifican la elección del rango de intensidades de pulsos estudiados. En particular describiremos la forma en que seleccionaremos la región de análisis, que será crucial para permitir la comparación de resultados obtenidos en sistemas de diferentes tamaños. En el Cap 5 mostraremos los resultados y discutiremos las condiciones que deben cumplirse para poder comparar cuantitativamente medidas realizadas sobre sistemas de diferente tamaño. Finalmente, en el Cap. 6 resumiremos las conclusiones de la presente tesis y propondremos líneas de investigación futuras a la luz de los resultados encontrados.

MARCO TEÓRICO

El estudio sistemático de los materiales granulares, como establecimos en el capítulo anterior, constituye una disciplina relativamente nueva. A lo largo de esta tesis nos referiremos a estados donde el material granular se encuentre en reposo en configuraciones de equilibrio mecánico.

Desde hace unos años se han enfocado esfuerzos, de distintos grupos de investigación en el mundo, hacia encontrar un marco teórico que pueda describir este tipo de materiales y su comportamiento. En particular se busca proponer una descripción macroscópica con la que, a partir de unos pocos parámetros, pueda definirse de forma unívoca el estado de una muestra. En la actualidad la propuesta más desarrollada a este fin es la teoría estadística granular de Edwards [28] que, como explicaremos de forma detallada en las secciones siguientes, utiliza algunas analogías existentes entre los materiales granulares y los sistemas termodinámicos.

Discutiremos en el presente capítulo que existen puntos de controversia entre resultados obtenidos en distintos laboratorios. Esto genera que la búsqueda de un marco teórico se vuelva incierta, ya que primero sería importante definir sobre los resultados de qué sistema y bajo qué condiciones contrastar la teoría propuesta.

En esta tesis vamos a trabajar sobre la hipótesis de que las diferencias observadas entre los distintos laboratorios está relacionada a efectos de tamaño de los sistemas estudiados. Con ese enfoque, en el presente capítulo, contaremos algunas de las discusiones abiertas acerca del tipo de comportamiento de estos materiales. Discutiremos acerca de los principales postulados de la teoría estadística granular de Edwards y las implicancias que estos postulados llevan. Para hacer esto, primero repasaremos de forma breve los principales postulados de la mecánica estadística clásica.

2.1 MECÁNICA ESTADÍSTICA

En esta sección repasaremos brevemente algunos conceptos básicos de la mecánica estadística, que serán utilizados en el resto de la presente tesis. Consideraremos sólo sistemas clásicos, donde las coordenadas y las velocidades de las partículas en el sistema resultan definidas y pueden tomar un rango continuo de valores.

El objetivo de la mecánica estadística consiste en explicar cómo el comportamiento macroscópico de un sistema surge del movimiento microscópico de sus componentes. Establece una relación entre cantidades macroscópicas (entropía S , volumen V , etc.) y cantidades microscópicas (posiciones y velocidades individuales de las partículas, etc.). Esta conexión resulta expresada en el postulado de Boltzman donde se define la entropía S de un sistema aislado del resto del universo (que mantiene por tanto su energía interna U constante) como proporcional al logaritmo del volumen Ω del espacio de fases accesible al sistema

$$S(U) = k_B \log \Omega, \quad (3)$$

donde k_B es conocida como la constante de Boltzman. Podemos escribir el volumen del espacio de fases de la forma

$$\Omega = C(N) \int \delta[H(\mathbf{q}) - U] d\mathbf{q} \quad (4)$$

donde H es el Hamiltoniano correspondiente al sistema y \mathbf{q} simboliza las coordenadas generalizadas de las partículas en el sistema que definen el estado a nivel microscópico. La función delta de Dirac selecciona todas las configuraciones que satisfacen la restricción impuesta al sistema de que su energía interna U debe permanecer constante. La constante $C(N)$ (con N el número de partículas en el sistema) depende del número de grados de libertad presentes y es necesaria para asegurar, por un lado la adimensionalidad del argumento del logaritmo y por otro lado la extensividad de la entropía S . Esta formulación establece una relación entre las cantidades microscópicas y macroscópicas del sistema porque, como podemos ver, el lado izquierdo de la ecuación contiene sólo información macroscópica, mientras que el lado derecho involucra sólo cantidades microscópicas.

En esta definición está implícita la suposición de que el sistema satisface el llamado principio ergódico. Este principio establece que para sistemas aislados, el promedio temporal \bar{A} de una dada propiedad física A medida sobre un tiempo suficientemente largo, resulta equivalente a realizar el promedio no pesado (o equiprobable) $\langle A \rangle$ sobre el espacio de estados microscópicos (o microestados). Esta propiedad permite obtener valores medios de variables del sistema sin necesidad de conocer su trayectoria temporal en el espacio de fases. Generalmente se parte de la suposición de ergodicidad de los sistemas bajo estudio y se justifica posteriormente la hipótesis, en virtud del acuerdo alcanzado entre la predicción teórica y los experimentos. Sin embargo, no todos los sistemas cumplen el principio ergódico, es decir, no todos los sistemas recorren una muestra representativa del espacio de fases al evolucionar en el tiempo. Es habitual encontrar materiales que bajo ciertas condiciones no cumplen este principio (por ejemplo los vidrios) y en los que se dirá que hay una “ruptura de ergodicidad”.

El tipo de descripción que acabamos de discutir, donde se considera un sistema aislado del resto del universo, que mantiene su energía interna U constante, es llamado *ensamble microcanónico*.

La restricción de sistema aislado no resulta adecuada en la mayoría de los casos, en los que estamos interesados en estudiar propiedades en sistemas que pueden intercambiar energía, volumen, masa, etc. con el resto del universo. Para esto resulta útil trabajar en otro tipo de ensamble que se adapte a la restricción impuesta al sistema en cada caso. Por ejemplo, podemos estar interesados en estudiar un sistema que, en contacto con un baño térmico con el que puede intercambiar energía U , posee una temperatura T constante (*ensamble canónico*). Recordemos que el formalismo termodinámico define la temperatura T como variable conjugada de U

$$1/T \equiv \partial S / \partial U, \quad (5)$$

y que por lo tanto T resulta una variable intensiva, es decir, que resulta independiente de N .

Es posible, partiendo la de descripción microcanónica, suponer un sistema aislado (con energía constante U) como compuesto de dos subsistemas, un subsistema R de gran tamaño, que tomará el papel de reservorio y un sistema B pequeño en contacto térmico con el anterior. De esta suposición es posible derivar ecuaciones que permitan predecir cantidades correspondientes al subsistema B , como función sólo de variables internas del mismo subsistema y de la temperatura T del baño térmico [47]. Así, es posible definir un valor medio U_B para el valor de la energía interna del sistema B mediante la ecuación

$$U_B(T) = \frac{\int H(\mathbf{q}_B) e^{-H(\mathbf{q}_B)/k_B T} d\mathbf{q}_B}{Z(T)}, \quad (6)$$

donde

$$Z(T) = \int e^{-H(\mathbf{q}_B)/k_B T} d\mathbf{q}_B \quad (7)$$

es la llamada función de partición del sistema. La Ec. (6) puede ser reescrita en términos de $Z(T)$ como (omitimos en adelante el sub índice B por referirnos siempre a variables pertenecientes al subsistema B)

$$U(T) = -\frac{\partial \ln Z(T)}{\partial \beta} \quad (8)$$

con $\beta = (k_B T)^{-1}$. De esta ecuación es fácil ver que $\ln(Z(T))$ es una función que escala con el número N de partículas en el sistema de la misma forma que U (recordemos que la energía interna es una variable extensiva). El valor de la energía interna presentará fluctuaciones σ_U respecto al valor U y puede demostrarse [47] que estas fluctuaciones pueden ser escritas a través de la relación

$$\sigma_U^2 = \partial^2 \ln(Z) / \partial \beta^2. \quad (9)$$

Para poder llevar adelante un análisis termodinámico en un sistema físico este debe satisfacer determinados requisitos. Algunos de los requisitos están relacionados con la necesidad de que, al menos localmente, el sistema pueda considerarse homogéneo a escala macroscópica, que las dimensiones de estos sistemas puedan considerarse infinitas con respecto a sus partes componentes (cuyo número debe ser muy grande) y que los efectos de superficie sean despreciables. Este es el llamado *límite termodinámico* [47]. En este límite las magnitudes que caracterizan al sistema pueden clasificarse en extensivas e intensivas. Las propiedades extensivas son aquellas cuya magnitud varía proporcionalmente con el tamaño (o número de partículas N) del sistema o subsistema analizado. Que una variable F sea una variable extensiva significa entonces que, dado un sistema A compuesto de dos sistemas A_1 y A_2 , cada uno con un número N_1 y N_2 de partículas, es posible escribir

$$F(A) = F(A_1) + F(A_2) \quad (10)$$

donde no hay término de correlación entre los distintos subsistemas. Una excepción a esta ecuación puede encontrarse en algunos estados críticos, donde existen correlaciones de largo alcance. Las propiedades intensivas por su parte son aquellas que permanecen invariantes, independientemente del tamaño del subsistema analizado. Alcanzado el límite termodinámico, los valores de estas cantidades resultan independientes de la forma o el tamaño de la región analizada (excepto por el escalado correspondiente de las variables extensivas). Dentro de las variables termodinámicas extensivas tenemos la entropía S , el volumen V , la energía interna U , etc. En el límite termodinámico puede verse que la Ec. (9) implica

$$\sigma_U \propto \sqrt{N}. \quad (11)$$

Este es un resultado importante y es válido para las fluctuaciones, en el límite termodinámico, de todas las magnitudes extensivas [47].

En esta tesis discutiremos bajo qué condiciones los estados estacionarios de un sistema granular estático cumplen con las propiedades del límite termodinámico y del principio ergódico.

2.2 MECÁNICA ESTADÍSTICA GRANULAR

Basándose en analogías entre los sistemas estudiados por la mecánica estadística y los sistemas granulares en el año 1989 Edwards y Oakeshott [28] proponen utilizar las herramientas y el formalismo matemático desarrollado por la mecánica estadística para formular un marco teórico para el

estudio de los materiales granulares. Las analogías sobre las que se basa esta propuesta son por un lado que ambos pueden considerarse compuestos de un número grande de partículas¹, y por el otro, que resulta posible reproducir el estado macroscópico de empaquetamientos granulares estáticos preparando al sistema bajo un mismo protocolo. Argumentan que los materiales granulares poseen una entropía S , pero que es el volumen V del empaquetamiento quien ocupará el lugar que la energía interna U ocupa en la mecánica estadística. Esto debido a que sin considerar la composición microscópica de cada grano, la energía de agitación térmica de un sistema granular a temperatura ambiente resulta despreciable.

A partir de las consideraciones mencionadas, la Ref. [28] propone una correspondencia entre las variables utilizadas en la mecánica estadística y las variables con las que intentarán caracterizar el sistema granular. Esta correspondencia se encuentra resumida en la Tabla 2.

Mecánica estadística	Estadística granular
U	V
$S(U; V; N)$	$S(V; N)$
H	W
$1/T = \partial S / \partial U$	$1/X = \partial S / \partial V$

Tabla 2.: Pasaje de la mecánica estadística a la mecánica granular propuesta por Edwards en 1989 [28].

Aquí la variable X es llamada compactividad y $W(\mathbf{q})$ es la función que determina el volumen V del sistema a partir de la configuración microscópica de los granos. Según Edwards la compactividad X , variable conjugada del volumen V , mide el grado de “esponjosidad” del sistema, lo que resultaría en: $X = 0$ para la configuración más densa y $X = \infty$ para la menos densa posible en el sistema [28]. Suele decirse que es una variable análoga a la temperatura T .

Utilizando el análogo granular al ensamble microcanónico (es decir, suponiendo fijo el volumen V del sistema) la entropía quedaría definida mediante la expresión

$$S(V) = \log \Omega \quad (12)$$

donde

$$\Omega = \int \delta[V - W(\mathbf{q})] \Theta(\mathbf{q}) \quad (13)$$

con

$$\Theta(\mathbf{q}) = \begin{cases} 1 & \text{Si la configuración } \mathbf{q} \text{ es mecánicamente estable} \\ 0 & \text{Si la configuración } \mathbf{q} \text{ no es mecánicamente estable} \end{cases} \quad (14)$$

La función $\Theta(\mathbf{q})$ cumple entonces la tarea de pesar en la integral sólo estados correspondientes a configuraciones mecánicamente estables.

En el trabajo mencionado [28] se plantea también la hipótesis de que todos los estados (microscópicos) compatibles con un V específico son equiprobables (en analogía con lo que sucede en el ensamble microcanónico). Esto está relacionado con el principio ergódico, que mencionamos en la sección anterior y resulta controversial en la comunidad granular. Se han realizado trabajos [6] que muestran en particular que esta propiedad es cumplida por los empaquetamientos granulares estáticos sólo bajo ciertas condiciones. Retomaremos esta discusión en la sección 2.4.

La formulación de la mecánica estadística granular desarrollada por Edwards abrió grandes perspectivas al estudio sistemático de los materiales granulados, apuntando al desarrollo de una teoría similar a la termodinámica que sea aplicable a estos sistemas. Para el desarrollo de esta teoría era

¹ Aunque se sabe que el número N de granos que puede conformar un medio granular resulta siempre órdenes de magnitud menor a los que contienen los sistemas atómicos clásicos, se propone que N en el bulk es lo suficientemente grande para que los argumentos estadísticos sean apropiados.

necesario, sin embargo, ser capaces de generar estados sobre los que verificar las predicciones que la teoría conlleva. En la sección siguiente contaremos acerca del método de generación de estados que utilizaremos en esta tesis.

2.3 ESTADOS ESTACIONARIOS DE EQUILIBRIO MECÁNICO EN GRANULARES

El método de generación de estados estacionarios estáticos que utilizaremos en este trabajo fue brevemente introducido en el Cap. 1 y consiste en la aplicación de golpes repetitivos sobre una muestra granular confinada. La aplicación de pulsos permite al sistema granular recorrer distintos microestados (es decir, cambiar su configuración microscópica), ya que, como hemos explicado en el capítulo introductorio, una vez que un material granular alcanza una configuración estática, permanece en ella a menos que se le perturbe de forma externa. Llamaremos al conjunto de microestados que atraviesa el sistema al ser perturbado de forma repetitiva la evolución temporal del mismo. Este conjunto de microestados poseen propiedades macroscópicas determinadas. En particular, es posible medir el volumen V ocupado por el sistema en cada una de estas configuraciones. Se ha visto [14, 19, 22–24, 35] que mediante la aplicación de un número suficiente de golpes, el volumen V que caracteriza a cada uno de los microestados tiende a un valor definido, y que fluctúa alrededor de este valor, a medida que el sistema “evoluciona en el tiempo”, con fluctuaciones bien definidas. Nos referiremos a esta colección de microestados como a un estado estático estacionario del sistema.

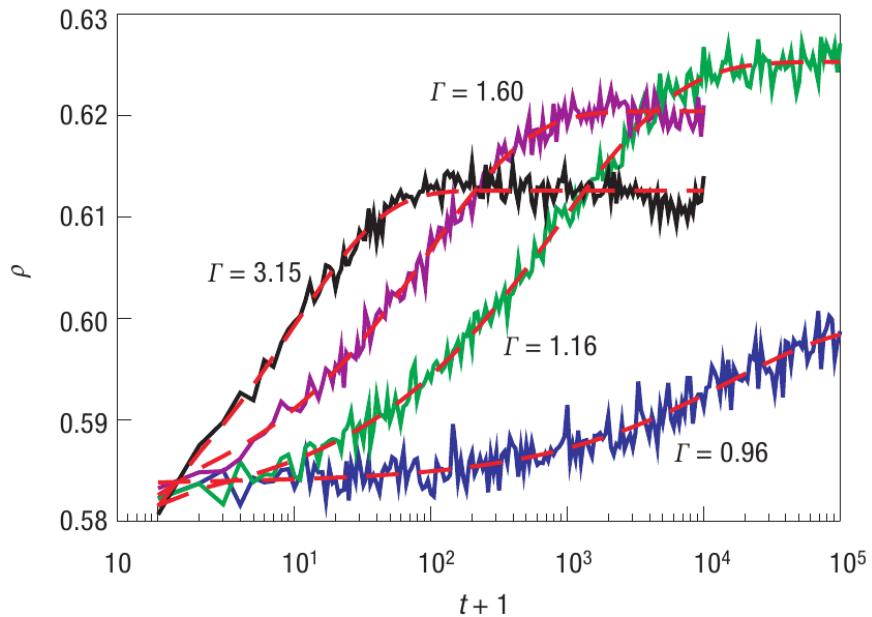


Figura 8.: Evolución de la densidad ρ (o equivalentemente ϕ) de un sistema granular en función del número de pulsos aplicados. Las curvas de diferentes colores corresponden a distintos valores de la aceleración reducida Γ (Ec. (2)) del pulso. Figura extraída de [22].

En la Fig. 8 podemos ver el valor de la densidad ρ (la densidad ρ aquí es equivalente a la fracción de volumen ocupado ϕ definida en la Ec. (1)) de un sistema granular, en función del número t de pulsos aplicados [22]. El sistema utilizado consiste en un tubo de acrílico, de 26mm de diámetro, que contiene partículas esféricas de vidrio de 1,6mm de diámetro, hasta alcanzar una altura aproxi-

mada de 13cm. Las curvas de diferentes colores corresponden a la aplicación de golpes con distinta

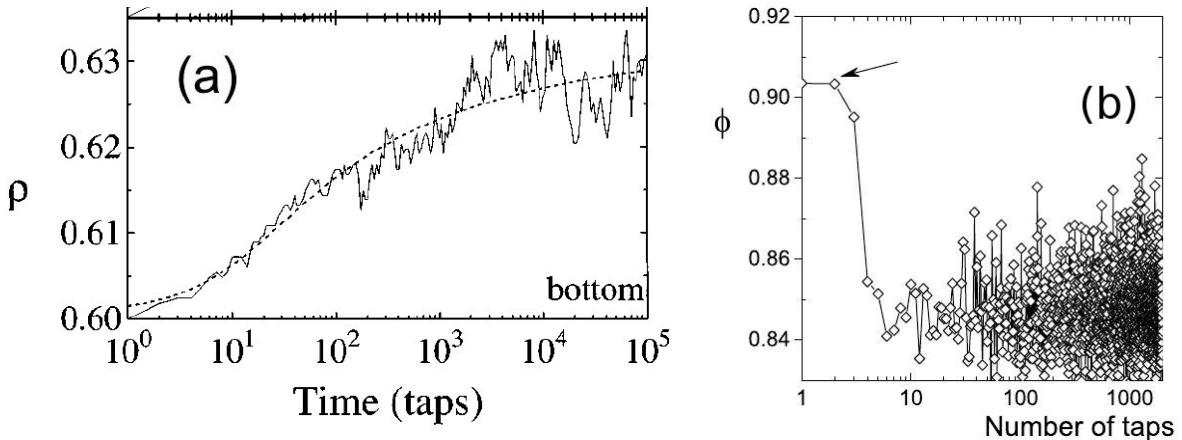


Figura 9.: Evolución de ϕ (o equivalentemente ρ) como función del número de pulsos aplicados correspondiente a resultados obtenidos en distintos laboratorios. (a) [19] $\Gamma = 6,8$ sobre una columna de material granular consistente en esferas de vidrio de tamaño monodisperso de $d = 2$ mm de diámetro, confinadas en una celda cilíndrica de diámetro $D = 9,1d$, hasta una altura $h \approx 500d$ (b) [14] $\Gamma = 7,0$ sobre un sistema bidimensional de discos de tamaño monodisperso de diámetro d , la celda contenedora tenía un ancho $L = 13,4d$ y la altura de la columna de granos $h \approx 37d$.

aceleración reducida Γ (Ec. (2)), es decir, de distinta intensidad. Podemos ver, que luego de un periodo transitorio, la densidad del sistema alcanza un valor estacionario, que depende del valor Γ del pulso. En esta imagen puede apreciarse que el modo en que esta evolución al equilibrio ocurre depende del valor de Γ de la perturbación. Se ha estudiado [19] que en algunos casos este comportamiento sigue una evolución de tipo logarítmica con el número de pulsos aplicados, como se ve en la Fig. 9 (a). Este resultado (extraído de la Ref. [19]) corresponde a una perturbación $\Gamma = 6,8$, sobre una columna de material granular, consistente en esferas de vidrio de tamaño monodisperso de $d = 2$ mm de diámetro, confinadas en una celda cilíndrica de diámetro $D = 9,1d$, hasta una altura $h \approx 500d$. En la Fig. 9 (b) vemos que también es posible que esta evolución suceda en un número reducido de pulsos, como lo muestra la Ref. [25]. El resultado de la Fig. 9(b) corresponde a la aplicación de $\Gamma = 7,0$, sobre un sistema bidimensional de discos de tamaño monodisperso de diámetro d . La celda contenedora tenía un ancho $L = 13,4d$ y la altura de la columna de granos $h \approx 37d$. A partir de las Figs. 9 (a) y (b) y de la Fig. 8 resulta evidente que existen distintos tipos de comportamientos en la evolución hacia valores estacionarios de las variables macroscópicas del sistema. También puede apreciarse que la forma en que los sistemas evolucionan hacia el estado estacionario no puede caracterizarse sólo por el valor de Γ aplicado: las curvas mostradas en las Figs. 9(a) y (b) corresponden a valores de Γ muy cercanos ($\Gamma = 6,8$. y $\Gamma = 7$ respectivamente) y sin embargo la evolución de los diferentes sistemas resulta naramedamente diferente.

En el Cap 1 vimos que el valor de ϕ en el estado estacionario es característico de la perturbación aplicada. Esto quiere decir, si un mismo sistema granular es perturbado con el mismo tipo de golpe de forma repetitiva, el valor ϕ que el sistema alcanza en el estado estacionario es independiente de su valor inicial. En la Fig.10 graficamos los resultados ϕ vs. Γ obtenidos por distintos grupos [19, 22, 25, 35] en sistemas de diferentes tamaños. Resulta evidente de esta figura que la utilización del parámetro Γ como caracterización de la perturbación aplicada al sistema no entrega información sobre el valor de ϕ en el estado estacionario si se utilizan sistemas diferentes. Distintos

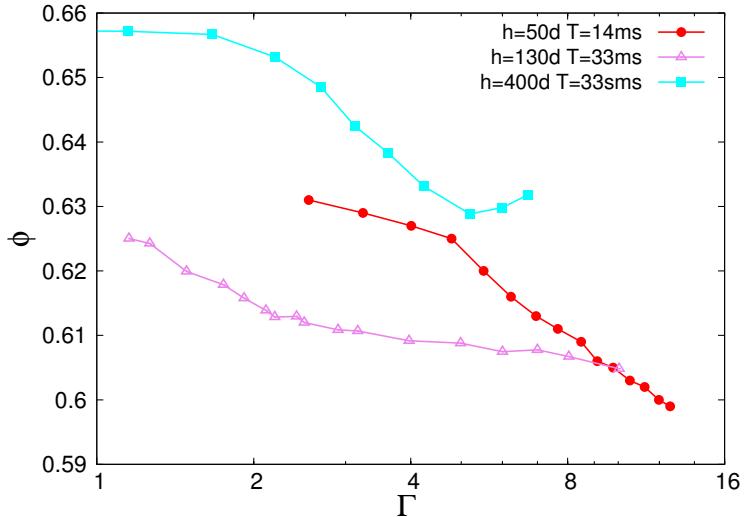


Figura 10.: ϕ vs. Γ para datos extraídos de distintas referencias, para sistemas tridimensionales de diferentes alturas h de columna de material granular, perturbados con pulsos senoidales de período T . Ref. [35] (roja), Ref. [34] (violeta), Ref. [19] (cian). Las barras de error no se incluyen por simplicidad, pero no afectan la distinguibilidad de las distintas curvas.

trabajos han propuesto la utilización de otros parámetros que permitan comparar resultados obtenidos con distintos tipos de perturbaciones. En esta tesis, basados en la Ref. [14], propondremos la utilización de un parámetro ϵ relacionado con la expansión efectiva que sufre el sistema durante la perturbación. En el Cap. 5 mostraremos que esta propuesta permite comparar resultados obtenidos perturbando sistemas de diferentes tamaños, haciendo colapsar, en el plano ϕ - ϵ , curvas que en el plano ϕ - Γ se encontraban desplazadas. Este colapso nos permitirá discutir sobre qué factores determinan el tipo de evolución que el sistema muestra en su evolución hacia el estado estacionario.

2.4 VARIABLES DE ESTADO

La descripción “termodinámica” requiere que pueda ser definido un conjunto reducido de variables macroscópicas que especifiquen el estado del sistema de forma unívoca. La teoría de la mecánica estadística granular propuesta por Edwards [28] sugiere que la variable macroscópica más importante en la descripción de los empaquetamientos granulares es el volumen V que éste ocupa (aquí el volumen V y la fracción de empaquetamiento ϕ se encuentran relacionadas de forma biúnica). Hemos indicado en el Cap. 1 que el comportamiento de la función ϕ vs. Γ se consideró monótono decreciente durante muchos años (ver Fig. 6). Esto generó expectativas respecto de la posibilidad de definir el estado estacionario estático de un empaquetamiento granular a partir de su valor ϕ como único parámetro.

Pugnaloni et al. [14] mostraron mediante simulaciones numéricas que ϕ vs. Γ no era una función monótona, sino que era decreciente hasta alcanzar un valor ϕ_{min} y luego se volvía una función creciente de Γ (ver Fig. 7). Esto permitía generar estados de igual ϕ mediante la aplicación de perturbaciones que inducían efectos muy diferentes en el sistema. En el año 2010 probamos experimentalmente [25] el comportamiento no monótono de ϕ vs. Γ . En el mismo trabajo y en trabajos posteriores [26] se mostró que estados de igual ϕ a un lado y otro del ϕ_{min} , es decir, obtenidos con perturbaciones de intensidad menor y mayor a la perturbación donde se obtiene el mínimo ϕ ,

eran distinguibles entre sí, refutando la hipótesis de que por sí solo V define el estado del empaquetamiento. Se mostró que una de las cantidades que permitía diferenciar estados de igual ϕ era la fluctuación de densidad $\Delta\phi$ respecto del valor medio. Este resultado mostraba que era necesario agregar variables macroscópicas al conjunto (V, N) si se quería determinar el estado de forma única. Una de las variables propuestas y más aceptadas fue el tensor de esfuerzos Σ .

El tensor de esfuerzos (*force moment tensor*) Σ de un sistema granular es una variable extensiva, y está definida en término de las posiciones y fuerzas de contacto de las partículas en el sistema [48]

$$\Sigma^{\alpha\beta} = \sum_{ij} r_{ij}^\alpha f_{ij}^\beta, \quad (15)$$

donde r_{ij}^α es la componente cartesiana α ($\alpha = x, y$ o z) del vector que une los centros de las partículas ij , f_{ij}^β es la componente cartesiana β de la fuerza de contacto entre la partículas y la sumatoria se extiende sobre todos los pares de partículas en contacto.

Σ se relaciona con el tensor de estrés σ convencional del sistema mediante

$$\Sigma = V\sigma. \quad (16)$$

Esta relación no resulta trivial ya que debemos tener en consideración que V no es constante, sino que como mostramos antes, resulta dependiente de la perturbación aplicada.

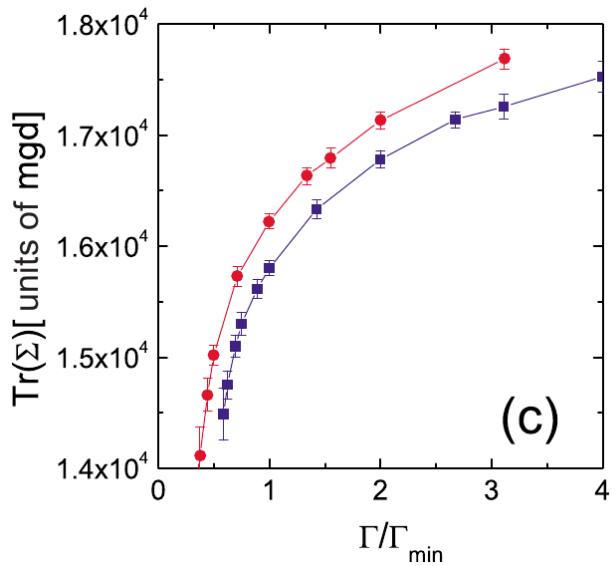


Figura 11.: Σ vs Γ / Γ_{min} donde Γ_{min} corresponde al valor Γ donde la fracción de empaquetamiento ϕ alcanza su valor mínimo ϕ_{min} . Este resultado corresponde a una implementación numérica de un sistema bidimensional de discos de tamaño monodisperso al que se le aplicó un protocolo de recocido siguiendo una rampa decreciente de intensidades. Las distintas curvas corresponden a diferentes frecuencias $\nu = 24,7\text{Hz}$ (círculos rojos) y $\nu = 49,4\text{Hz}$ (cuadrados violetas) del pulso externo aplicado. Figura extraída de [25].

Hemos mostrado [25] que a diferencia de la función ϕ vs. Γ (que resulta no monótona como puede verse en la Fig. 7), la función de Σ vs. Γ es una función monótona creciente, como puede verse en la Fig. 11. Estos resultados fueron obtenidos de forma numérica y las diferentes curvas corresponden a la repetición del protocolo de recocido (siguiendo una rampa decreciente de intensidades) con dos frecuencias diferentes: $\nu = 24,7\text{Hz}$ (círculos rojos) y $\nu = 49,4\text{Hz}$ (cuadrados violetas). Esto hace

que sea posible distinguir estados de igual ϕ (obtenidos con dos Γ muy diferentes en intensidad) a partir del valor de su tensor de esfuerzos. De igual forma, también se probó [26] que es posible, variando las características de la perturbación aplicada, obtener estados que presenten igual valor de su tensor de esfuerzos a distinta densidad.

Trabajos recientes [25, 26, 49, 50] proponen al conjunto (V, Σ, N) como el de las variables necesarias para la definición macroscópica del estado.

2.5 RESUMEN DEL PROBLEMA A RESOLVER

Hemos mostrado en este capítulo algunas de las características del comportamiento de los materiales granulados que presentan diferencias al ser estudiadas sobre sistemas de diferente tamaño. Algunas de las diferencias expuestas son de carácter cualitativo, como la forma en que los sistemas evolucionan hacia el estado estacionario estático, o el comportamiento de la fracción de empaquetamiento ϕ en función de la aceleración reducida del pulso aplicado Γ . Otras diferencias son de índole cuantitativa, como las diferentes curvas de comportamiento monótono decrecientes de ϕ vs. Γ , mostradas en la Fig. 10. Discutimos que hay cierto consenso en que el conjunto de variables macroscópicas extensivas que definen unívocamente los estados estáticos de equilibrio mecánico de un granulado es (V, Σ, N) . En este trabajo nos enfocaremos en el estudio de la dependencia (cuantitativa y cualitativa) de estas variables con el tamaño del sistema considerado.

3

SIMULACIÓN Y MÉTODOS DE ANÁLISIS

En este capítulo presentaremos las herramientas numéricas que utilizamos a lo largo del trabajo. Explicaremos primero el modelo numérico, llamado de esferas blandas con fricción y la técnica de elementos discretos, utilizados para la simulación de los sistemas granulares. Luego detallaremos la implementación realizada del protocolo de compactación por golpes, utilizado para generar las diferentes configuraciones estáticas sobre las que realizaremos los análisis, y las características principales del sistema perturbado. Finalmente expondremos la forma en que realizamos las medidas de las propiedades macroscópicas del sistema, sobre las configuraciones estáticas obtenidas, y los métodos de análisis utilizados para obtener los valores medios, las estimaciones de error y las fluctuaciones de las propiedades medidas.

3.1 SIMULACIÓN POR ELEMENTOS DISCRETOS DE ESFERAS BLANDAS CON FRICTION

Este es un modelo numérico de sistemas granulares que ha sido ampliamente estudiado y utilizado [44–46, 51, 52]. Busca generar una dinámica realista de las partículas. Para esto propone fuerzas de contacto interpartículas, normales y tangenciales, e integra las ecuaciones de movimiento de Newton-Euler para obtener la trayectoria de los granos de forma similar a la dinámica molecular. Las fuerzas de contacto utilizadas contienen contribuciones conservativas y disipativas.

En la Fig. 12 puede verse un esquema del modelo de esferas blandas. Se representan dos partículas i

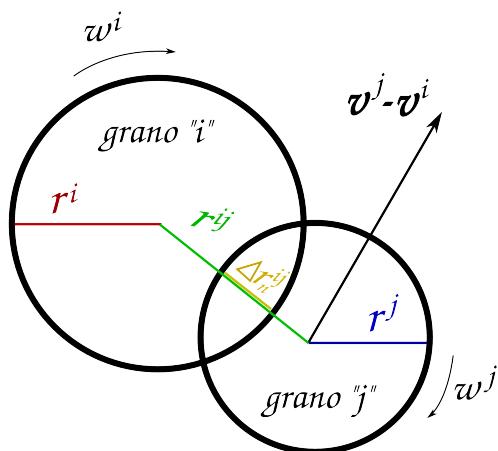


Figura 12.: Esquematización de dos granos en colisión, donde se pueden ver las cantidades utilizadas en las Ecs. (17) y (18) para las fuerzas de contacto normal y tangencial.

y j , de radios r^i y r^j , separadas por una distancia r^{ij} (en el caso particular de la Fig. 12 esta distancia resulta menor que la suma de sus radios). Dos partículas se consideran en contacto cuando su solapamiento o penetración normal $\Delta r_n^{ij} = r^i + r^j - r^{ij}$ resulta mayor que cero.

La fuerza de contacto normal contiene un término restitutivo proporcional al solapamiento Δr entre los granos, y un término disipativo dependiente de la velocidad normal relativa $v_n^{ij} = (\mathbf{v}^j - \mathbf{v}^i) \cdot \hat{\mathbf{n}}$ con que las partículas ij colisionan (aquí $\hat{\mathbf{n}}$ es el versor en la dirección que une los centros de las partículas en colisión). Así, la interacción normal entre la partícula i y la partícula j está dada por:

$$F_{normal}^{ij} = \begin{cases} -k_n \Delta r_n^{ij} - m_{eff} \gamma_n v_n^{ij} & \Delta r_n^{ij} < 0, \\ 0 & \Delta r_n^{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (17)$$

donde $m_{eff} = m^i m^j / (m^i + m^j)$ es la masa efectiva del par, k_n representa la constante normal elástica y γ_n la constante de amortiguación viscosa para la intracción normal.

La interacción tangencial posee un término disipativo, proporcional a la velocidad tangencial relativa de las partículas durante la colisión y un término restitutivo asociado al desplazamiento tangencial Δr_t^{ij} , acumulado desde el inicio del contacto

$$F_{tang}^{ij} = -k_t \Delta r_t^{ij} - m_{eff} \gamma_t v_t^{ij} \quad (18)$$

donde k_t es la constante elástica para la interacción tangencial, γ_t es la constante tangencial de amortiguación viscosa y $v_t^{ij} = (\mathbf{v}^j - \mathbf{v}^i) \cdot \hat{\mathbf{s}} + \omega^i r^i + \omega^j r^j$ es la velocidad tangencial relativa entre las partículas i y j (donde $\hat{\mathbf{s}}$ es el versor perpendicular a la dirección que une los centros de las partículas i y j y ω^k es la velocidad de rotación). Si consideramos que a $t = t_0$ se inicia el contacto entre las partículas, resulta $\Delta r_t^{ij} = \int_{t_0}^t v_t^{ij}(t') dt'$. Esta fuerza tangencial se encuentra acotada a partir de la implementación del criterio de Coulomb para la fricción estática $F_{tang}/F_{normal} \leq \mu$, con μ el coeficiente de roce entre las partículas. Así, mientras F_{tang}^{ij} resulte menor que μF_{normal} , la fuerza de interacción tangencial estará dada por la Ec. (18), pero cuando esta función resulte mayor que el valor dado por el criterio de Coulomb, el valor de la fuerza tangencial se fija según

$$F_{tang}^{ij} = \mu F_{normal}^{ij}, \quad (19)$$

y se mantiene en este valor mientras las partículas conserven el contacto. Este modelo no diferencia entre coeficiente de fricción estático o dinámico. En la Fig. 12, se muestran de forma esquemática las magnitudes utilizadas en las Ecs. (17) y (18).

Para implementar el modelo de simulación de esferas blandas con fricción utilizamos el paquete de código abierto LAMMPS [53] desarrollado por los laboratorios SANDIA. Las principales características del paquete LAMMPS se encuentran enumeradas en el Apéndice A.

Para integrar las ecuaciones de Newton-Euler, a partir de las fuerzas dadas en las Ec. (17) y (18), LAMMPS utiliza el algoritmo de Verlet con Velocidades [54]. Este algoritmo es especialmente adecuado debido a la dependencia con las velocidades que presentan las fuerzas de contacto. El algoritmo de Verlet con velocidades, a diferencia del algoritmo de “salto de rana” (*leap-frog*), proporciona los valores de las posiciones y velocidades de las partículas (así como sus orientaciones y velocidades angulares) en el mismo instante de tiempo.

En la Fig. 13 mostramos, de forma esquemática, el modo en que se implementa el integrador Verlet con velocidades para el cálculo de las posiciones y velocidades lineales. Un esquema similar se

utiliza para obtener las orientaciones y velocidades rotacionales (ya que las esferas con fricción están sometidas a torques). Los casilleros en gris contienen los valores, a tiempo t , de las coordenadas \mathbf{r} , las velocidades \mathbf{v} y las aceleraciones \mathbf{a} . El cálculo de las nuevas posiciones \mathbf{r} , para el siguiente paso de tiempo $t + dt$, se calcula mediante la ecuación

$$\mathbf{r}(t + dt) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)dt + 0,5\mathbf{a}(t)dt^2. \quad (20)$$

Para obtener los nuevos valores de \mathbf{v} , se utilizan los valores de \mathbf{v} y \mathbf{a} a tiempo t , pero se calcula para un tiempo intermedio (flechas azules en Fig. 13), empleando un paso de tiempo $dt/2$

$$\mathbf{v}(t + dt/2) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)dt/2. \quad (21)$$

Con los valores actualizados de \mathbf{r} y \mathbf{v} se calculan las fuerzas, utilizando las Ecs. (17) y (18) y con estas fuerzas se actualiza el valor de la aceleración al tiempo $t + dt^1$.

$$\mathbf{a}(t) = f(t)/m \quad (22)$$

Finalmente, se recalcula el valor de la velocidad, utilizando nuevamente la Ec. (21), con los valores correspondientes a \mathbf{a} calculado a tiempo $t + dt$ y el valor de \mathbf{v} calculado a tiempo $t + dt/2$ (flechas naranjas en Fig. 13). El proceso es repetido de forma iterativa, obteniendo \mathbf{r} , \mathbf{v} y \mathbf{a} a intervalos de tiempo dt para el período de tiempo de interés.

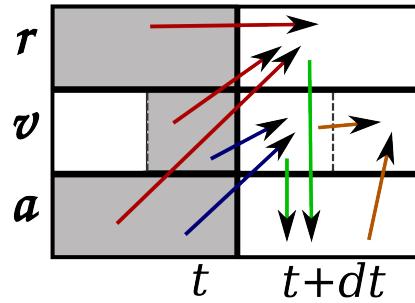


Figura 13.: Implementación esquemática del integrador Verlet con velocidades [54]. En gris se representan los casilleros que contienen la información de las magnitudes \mathbf{r}, \mathbf{v} y \mathbf{a} a tiempo t . Las flechas indican las cantidades que intervienen en el cálculo para cada una de estas variables, (rojas) para \mathbf{r} , (azules) para la primera actualización de \mathbf{v} , (verdes) para \mathbf{a} y finalmente (naranjas) para la última actualización de \mathbf{v} . Notemos que el cálculo de \mathbf{v} se realiza en dos etapas, cada una de las cuales avanza medio paso de tiempo. Al finalizar esta implementación, se tienen los valores de \mathbf{r}, \mathbf{v} y \mathbf{a} a un mismo tiempo $t + dt$.

Para llevar a cabo el cálculo y la actualización de las velocidades angulares y las orientaciones de los granos, se aplica el mismo método de integración descrito anteriormente. Sin embargo, debido a que la utilización de los ángulos de Euler para integrar estas ecuaciones presentan divergencias cuando el ángulo azimutal $\Theta = 0$ [54], se utiliza, en el modelo implementado por LAMMPS, el método de los cuaterniones, introducido por Hamilton [57], para evitar esta singularidad.

Este modelo de simulación permite la implementación de superficies, que limiten el movimiento de las partículas. La interacción de los granos con estas “paredes” se genera implementando el mismo modelo de fuerzas de contacto que se explicó para la interacción partícula–partícula. Es posible sin embargo, fijar constantes de interacción k_n , k_s , etc. (Ecs. (17) y (18)) específicas para la interacción pared–partícula, distintas a las que definen la interacción grano–grano.

¹ Nótese que las fuerzas así estimadas utilizan valores de \mathbf{r} y \mathbf{v} desplazados $dt/2$ unos de otros. Si bien hay propuestas para evitar esta aproximación [55], LAMMPS utiliza la implementación descrita y los resultados parecen no diferir significativamente [56].

3.2 GENERACIÓN DE CONFIGURACIONES DE EQUILIBRIO MECÁNICO

En esta sección detallaremos el método con que hemos perturbado al sistema para generar las distintas configuraciones de equilibrio, sobre las que se medirán las cantidades macroscópicas que definen el estado estacionario.

Consideraremos un sistema granular confinado en una celda que, bajo la acción del campo gravitatorio, se encuentra en reposo en equilibrio mecánico.

Hemos discutido que a partir de la aplicación de golpes de forma repetitiva sobre un sistema granular confinado en una celda o silo, es posible alcanzar estados donde las propiedades macroscópicas (volumen V , tensor de esfuerzos Σ , etc.) resultan estacionarias. Esto significa que los distintos valores de V o Σ , medidos sobre la serie de configuraciones de equilibrio obtenidas por la aplicación de pulsos sobre el sistema generan una distribución con valor medio y dispersión bien definidas. Es posible entonces asociar, a partir del valor medio de las distribuciones resultantes, valores de V o Σ al estado estacionario alcanzado por el sistema. El valor alcanzado por las cantidades macroscópicas en estos estados estacionarios queda determinado a partir de la intensidad Γ del golpe aplicado.

Desarrollaremos a continuación los dos métodos que hemos utilizado para perturbar el sistema granular en la presente tesis.

3.2.1 Pulsos armónicos

En el primer método la perturbación consistió en la aplicación de un ciclo completo de onda seno, de frecuencia angular ω constante (igual a $2\pi 30\text{Hz}$) y amplitud A . La forma funcional del pulso aplicado resulta

$$A \operatorname{sen}(\omega t) \quad (23)$$

Variaremos A como parámetro de control. Esta amplitud resulta proporcional a la aceleración reducida Γ , definida en la Ec. (2), ya que mantenemos fijo el valor de ω . A lo largo de este trabajo, nos referiremos entonces, cuando esto no genere ambigüedades, a la “intensidad del golpe aplicado”, a la amplitud A del pulso, o a Γ , de forma indistinta, para discutir comportamientos cualitativos de los parámetros V o Σ .

Utilizaremos valores de A comparables con el diámetro d de las partículas (variando entre $0,5d$ y $5d$). La aplicación de golpes con estos valores de A produce que los granos que conforman el sistema se despeguen considerablemente de la base de la celda, separándose entre ellos mismos distancias comparables con su propio diámetro. En la Fig. 14 puede verse una serie de “fotos” del sistema, desde que se le aplica una perturbación (encontrándose en un estado de equilibrio mecánico inicial) hasta que vuelve a quedar en reposo, alcanzando un nuevo estado de equilibrio mecánico. Puede verse que la perturbación no se propaga de forma homogénea en el sistema, con regiones que sufren una expansión entre partículas relativamente mayor.

Este tipo de perturbaciones ha sido estudiado en numerosos trabajos [14, 22–24, 43, 58]. Sin embargo, el rango de intensidades aplicado aquí ha sido sensiblemente menos estudiado, dado que requiere por un lado tiempos de cálculo mucho mayores, y por otro lado, porque su implementación experimental resulta difícil y requiere equipamientos particulares (hemos llevado adelante sin embargo, algunos trabajos experimentales [25] en este régimen de intensidades).

El modo en que generamos los estados estacionarios del sistema sigue un método de “recocido” similar al propuesto por Nowak et al. [19] (explicado en el Cap. 1). A diferencia de Nowak et al. nosotros comenzamos de altas amplitudes y utilizamos sólo una rampa de amplitudes decreciente.

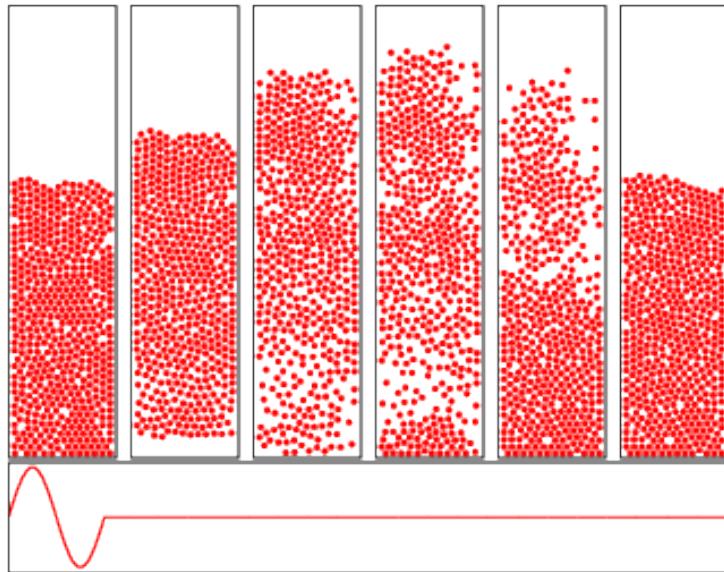


Figura 14.: Secuencia de “fotos” que muestra a las partículas del sistema durante el movimiento que sufren como consecuencia de la perturbación. Esta perturbación corresponde a un valor de $A = 2d$. El sistema consiste en 500 esferas de igual tamaño confinadas en una celda quasi-bidimensional (ver Secc. 3.2.2).

Así, luego de comenzar la aplicación de pulsos sobre una configuración inicial conseguida por el simple llenado de la celda, la configuración inicial del sistema para cada nueva amplitud de golpe será la configuración final que se obtuvo de la aplicación del A previo. Cabe aclarar que utilizaremos este protocolo sólo por consistencia con trabajos experimentales de otros autores. La aplicación de este método de recocido no resulta indispensable en nuestro caso. Como se dijo en el capítulo anterior, el sistema alcanza, para estas amplitudes, el régimen de estados estacionarios luego de la aplicación de unos pocos pulsos [14].

3.2.2 *Expansión homogénea*

Implementamos también, con el objetivo de aislar los efectos de expansión inhomogénea producidos en el sistema por la perturbación explicada anteriormente, una perturbación artificial homogénea. Esta perturbación fue obtenida multiplicando la coordenada en la dirección del campo gravitatorio de todas las partículas en el sistema en reposo, por un mismo valor $r > 1$. Esto induce una expansión homogénea en la dirección vertical de modo que las heterogeneidades observadas en la Fig. 14, debido a la perturbación efectiva a que es sometida cada capa durante la propagación del pulso realista, son eliminada. Antes de dejar caer las partículas, evolucionando bajo la acción de la gravedad, asignamos velocidades de magnitud fija (pequeña) y dirección aleatoria para introducir desorden y permitir al sistema explorar distintas configuraciones. Con la implementación de este tipo artificial de pulso conseguimos que todas las partículas en el sistema se vean afectadas por el mismo tipo de perturbación, independientemente de su posición vertical en la columna de granos.

3.3 IMPLEMENTACIÓN Y SISTEMA BAJO ESTUDIO

Utilizaremos en este trabajo el sistema de unidades reducidas $m \ g \ d$. Es decir, escalaremos todas las propiedades del sistema utilizando como unidad de distancia el diámetro d de las partículas, como unidad de aceleración el valor de g de la aceleración gravitatoria, y como unidad de masa la masa m de un grano (utilizamos partículas esféricas de igual diámetro y masa).

En la Tabla 3 se detallan los valores de las constantes de interacción (para las fuerzas dadas en las Ecs. (17) y (18)).

Parámetro	Valor
k_n	$10^5 \ mg/d$
k_t	$2/7 k_n$
γ_n	$300 \sqrt{g/d}$
γ_t	$200 \sqrt{g/d}$
μ	0,5

Tabla 3.: Constantes utilizadas en la implementación del modelo numérico en unidades reducidas.

Utilizamos las mismas constantes para la interacción grano–grano que para la interacción grano–pared.

El paso de tiempo $dt = 10^{-4} \sqrt{d/g}$ fue elegido teniendo en consideración el criterio dado en la Ref. [45], para garantizar que la duración de las colisiones equivalga a un mínimo de 100 dt , lo que permite una integración suficientemente precisa de las fuerzas durante la colisión. El tiempo que dura una colisión está relacionado con las constantes mecánicas del sistema (Tabla 3) y con las velocidades que las partículas adquieren durante la simulación. Los valores de A utilizados en esta tesis para generar los golpes hacen que las velocidades iniciales de las partículas resulten altas comparadas con trabajos que utilizan, con la misma frecuencia angular ω , amplitudes menores a $2d$. Por esto resultó necesario utilizar un paso de tiempo menor para la integración del movimiento que tenga esto en consideración. Las constantes utilizadas (Tabla 3) están pensadas para garantizar un compromiso entre los tiempos necesarios para llevar adelante la simulación y el realismo de las interacciones.

La configuración inicial del sistema se consiguió generando de forma aleatoria valores para la posición de los centros de un número N de partículas ($250 \leq N \leq 4500$) sin producir solapamientos (teniendo en cuenta el diámetro de cada partícula) dentro de una región que se ubicaba en el interior de la celda contenedora y a una altura de $180d$ de la base de la misma. La velocidad inicial de cada partícula se fijó igual a cero y se dejó evolucionar el sistema bajo la acción de la gravedad hasta el equilibrio mecánico. El criterio utilizado para decidir si el equilibrio mecánico ha sido alcanzado consistió en verificar si la energía cinética total K del sistema cumplía la condición $K < 0,01 \ gdm$. La energía K del sistema podía aun evolucionar hacia valores menores, pero verificamos que una vez alcanzado el valor de K propuesto las propiedades macroscópicas del sistema, como V y Σ , dejaban de evolucionar en el tiempo. Esto nos permitía un compromiso razonable para los tiempos de simulación utilizados.

Para generar la perturbación se desplazó tanto la base como las paredes que conforman la celda en la dirección vertical, siguiendo la forma del pulso indicada en la Ec. (23). Luego de un periodo completo de onda se detiene la celda y se espera a que el sistema alcance nuevamente el equilibrio mecánico (con la condición sobre la energía cinética explicada en el parrafo anterior). Comenzamos

desde el mayor valor de A estudiado (generalmente $5d$) y aplicamos 200 golpes. Luego disminuimos A y aplicamos 200 golpes nuevamente. Esto lo repetimos para cada amplitud utilizada. El paso de A es variable y lo ajustamos según la velocidad con que cambian las propiedades medidas (especialmente ϕ) en las cercanías de cada valor de A . En particular, la velocidad de cambio de ϕ para altas amplitudes es lenta, pero se vuelve pronunciado a bajas amplitudes. Este comportamiento se verá claramente en los capítulos siguientes. Para determinar los valores de A apropiados para recorrer la rampa decreciente utilizada en este trabajo realizamos múltiples pruebas preliminares.

Descartamos las 100 primeras configuraciones obtenidas con cada amplitud y conservamos las 100 restantes para realizar los análisis posteriores. Hemos observado que 100 golpes son más que suficientes para que el sistema alcance el estado estacionario. Repetimos este protocolo de recocido típicamente 20 veces, comenzando en cada caso de una configuración inicial diferente. A lo largo de este trabajo hemos simulado alrededor de 5×10^5 golpes sobre sistemas de diferentes tamaños y utilizando diferentes amplitudes A . Cada uno de los pulsos requirió entre 10^5 y 10^7 pasos de integración para que el sistema retorne al equilibrio. El tiempo de CPU necesario para llevar a cabo el conjunto de simulaciones fue mayor a 5000 horas.

Utilizamos una celda cuasi bidimensional como la que se esquematiza en la Fig. 15, con un espesor 10% superior al diámetro de las partículas. Este tipo de celdas es el que corresponde a la configuración experimental con que en trabajos previos comparamos nuestros resultados numéricos [25, 26]. Esta implementación cuasi-bidimensional resulta diferente a una estrictamente bidimensional, donde las partículas son forzadas a mantenerse en un plano y no presentan interacción con las paredes frontal y trasera de la celda. En este trabajo prestaremos especial atención al comportamiento del tensor de esfuerzos Σ y su dependencia con el tamaño de la celda en que el sistema se encuentra confinado. Es por esto que buscamos representar una interacción realista con las paredes, tanto laterales como frontal y trasera de la celda. En el capítulo siguiente (Cap. 4), mostraremos resultados que evidencian las diferencias que surgen de tener o no en cuenta la interacción del sistema con las paredes frontales.

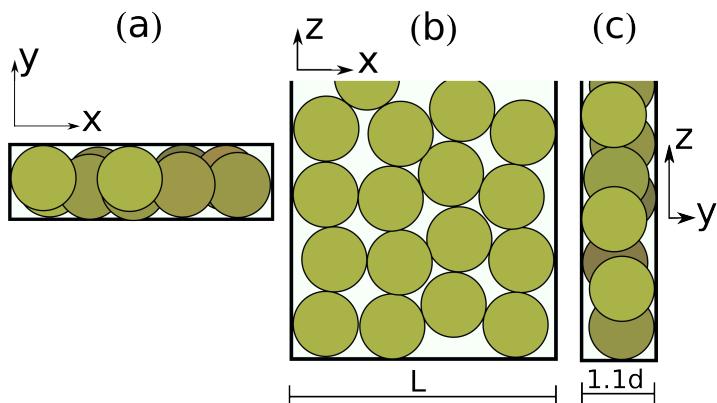


Figura 15.: Esquema del tipo de celda cuasi-bidimensional utilizada. (a) Vista superior. (b) Vista frontal. (c) Vista lateral. El espesor de la celda es $1.1d$.

3.4 MÉTODOS DE ANÁLISIS

El cálculo tanto de la densidad como del tensor de esfuerzos en sistemas granulares presenta complicaciones particulares, y la elección del método apropiado no resulta trivial.

3.4.1 *Medidas de ϕ y áreas de Voronoi*

Se han desarrollado distintos métodos para el cálculo experimental de la fracción de empaquetamiento ϕ . La principal dificultad que presenta la realización de esta medida se encuentra en sistemas tridimensionales, donde no resulta simple conocer las posiciones de las partículas en el interior del sistema. En el experimento de Chicago [19], por ejemplo, estudian un sistema tridimensional de partículas de vidrio en el interior de un tubo alto y angosto. Para obtener el valor de ϕ , desarrollan un método basado en la medición de la capacidad eléctrica C colocando a lo largo del tubo que contiene los granos capacitores eléctricos circulares. El valor de C resulta dependiente de la densidad del material dieléctrico que estos capacitores rodean. Utilizando la relación que conecta estos dos valores, el Grupo de Chicago fue capaz de obtener el valor de ϕ correspondiente a cada configuración. Otros trabajos experimentales realizados sobre sistemas tridimensionales utilizan métodos de absorción de rayos γ [22], o miden la altura de la columna granular utilizando un sistema de cámaras perpendiculares [24].

En sistemas bidimensionales, el cálculo de ϕ presenta menos complicaciones ya que pueden conocerse (fotografiando la configuración y aplicando análisis de imágenes) las posiciones de las partículas con bastante precisión. Aún en estas configuraciones se han desarrollado distintas técnicas de análisis. Un método de análisis por ejemplo, útil para sistemas compuestos de partículas opacas, consiste en aplicar un filtro a la imagen que represente con blanco las zonas con intensidad de luz por encima de un determinado umbral y con negro el resto de la imagen. Esto permite, midiendo la cantidad de píxeles en negro y realizando un cociente entre este valor y el valor de la cantidad total de píxeles en el sistema, obtener ϕ .

En esta tesis aplicaremos una técnica basada en la teselación del plano a través de polígonos de Voronoi [59]. Un Diagrama de Voronoi de un conjunto de puntos no es más que la subdivisión del plano en conjuntos disjuntos de regiones que lo cubren por completo (las celdas de Voronoi). En la Fig. 16 se ve un ejemplo de esta teselación aplicada al conjunto de puntos correspondientes a los centros de las partículas para una dada configuración. Vemos que cada celda de Voronoi contiene un y sólo un centro del conjunto de centros dado. La principal característica de esta teselación es que todos los puntos del área que contiene cada celda de Voronoi resultan más cercanos al centro de la partícula que contienen que al centro de cualquier otra partícula. Esto permite asociar a cada partícula un área o celda de Voronoi correspondiente. La densidad local (o ϕ_{local}) puede definirse como el cociente entre el área de la partícula y el área de la celda de Voronoi que la contiene.

La forma en que se realiza esta teselación se muestra esquematizada en la Fig. 16 y consiste en calcular primero los segmentos que unen los centros de partículas cercanas (líneas de trazo en rojo) y trazar luego la mediatrix de cada uno de estos segmentos. La intersección de estas mediatrixes delimitan un área (marcada en línea continua roja) que contiene al punto central y es el área de Voronoi. Existe una teselación equivalente, de volúmenes de Voronoi, para el espacio tridimensional. En este trabajo utilizamos la teselación de Voronoi del plano aunque, como explicamos antes, nuestro sistema es estrictamente hablando, tridimensional. Tomamos para esto la proyección de las partículas en el plano $x - z$ y fijamos su coordenada $y = 0$. Tomar esta proyección induce un leve solapamiento entre las partículas, arrojando densidades mayores a las que resultarían de un sistema estrictamente bidimensional. Utilizaremos este tipo de proyección sin embargo ya que este

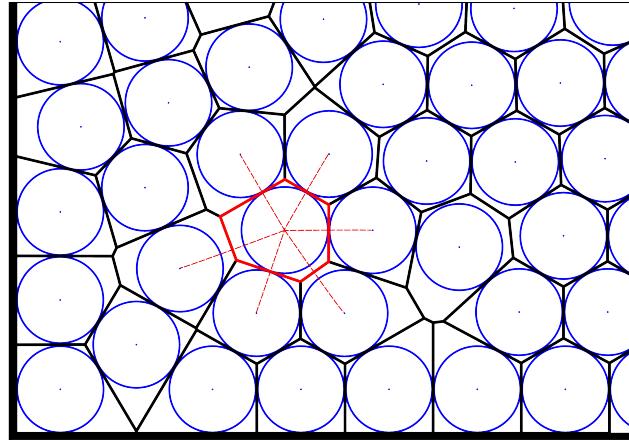


Figura 16.: Teselación del plano mediante las celdas de Voronoi. Esta “foto” corresponde a la esquina inferior izquierda de una celda. Pueden verse que las partículas en contacto con las paredes se asocian a áreas de Voronoi que resultan sistemáticamente mayores que las de las partículas en el interior del sistema.

El mismo efecto se obtiene en las fotografías de experimentos de sistemas confinados en celdas cuasi bidimensionales.

En la Fig. 16 puede observarse que las partículas en contacto con las paredes y el fondo de la celda tienen sistemáticamente asociadas áreas de Voronoi mayores que las de las partículas en el interior del sistema. Este efecto de borde hace que el ϕ local asociado a estas partículas resulte menor que el asociado al resto de las partículas en el sistema. Es por esta razón que las medidas de ϕ se realizarán sobre regiones que eviten considerar partículas “de superficie”. La forma en que llevaremos a cabo la elección de estas regiones en el presente trabajo será discutida en el siguiente capítulo (Cap. 4).

Para la realización de la teselación de Voronoi utilizamos el programa de código abierto *Voro++* [60], que permite, entre otras cosas, implementar este tipo de teselaciones tanto para sistemas bidimensionales como tridimensionales, mono y polidispersos.

3.4.2 Tensor de esfuerzos

Llevar adelante medidas experimentales del tensor de esfuerzo Σ resulta aún más complejo que en el caso de ϕ . En sistemas tridimensionales resulta imposible obtener valores de Σ para cada partícula ya que no existen técnicas para medir las fuerzas de contacto interpartículas en el interior del sistema. Es posible, sin embargo, realizar medidas de forma global (midiendo por ejemplo la presión que el sistema ejerce sobre las paredes), pero existe poco desarrollo experimental en este sentido. Sobre sistemas bidimensionales se han realizado estudios que permiten, utilizando partículas de material fotoelástico colocadas entre dos polarizadores cruzados (ver por ejemplo la Fig. 2), obtener las fuerzas de contacto sobre cada partícula y, con esto, calcular el Σ para cada grano del sistema. Sin embargo, este método también posee sus complicaciones, ya que los patrones de luz generados no resultan lineales con la tensión aplicada y es necesario implementar complicados algoritmos para obtener cuantitativamente las fuerzas de contacto a partir de la imagen. Por todo esto es que las herramientas de simulación numérica cobran gran importancia en el estudio de Σ .

Obtendremos valores de Σ calculados por el paquete LAMMPS (Apéndice A). LAMMPS, utilizando las fuerzas de contacto entre partículas dadas en las Ecs. (17) y (18), calcula el valor de Σ mediante la Ec. (15). Esto nos permite asociar a cada partícula un valor local de tensor de esfuerzos. Dado que estudiaremos configuraciones en equilibrio mecánico, Σ resulta un tensor simétrico.

De las 6 componentes independientes sólo nos concentraremos en los elementos diagonales. En particular, a lo largo de esta tesis consideraremos la traza del tensor de esfuerzos, calculada como $\text{Tr}\Sigma = \Sigma^{xx} + \Sigma^{zz}$, sin incluir los valores correspondientes a Σ^{yy} ya que resultan dos ordenes de magnitud menor a las otras dos componentes diagonales.

3.4.3 Valores medios y fluctuaciones

Una vez obtenidos los valores locales de densidad y tensor de esfuerzos, realizamos una serie de promedios para obtener los resultados que discutiremos en los capítulos siguientes. Aquí mostraremos de qué forma hemos realizado estos promedios y especificaremos la nomenclatura.

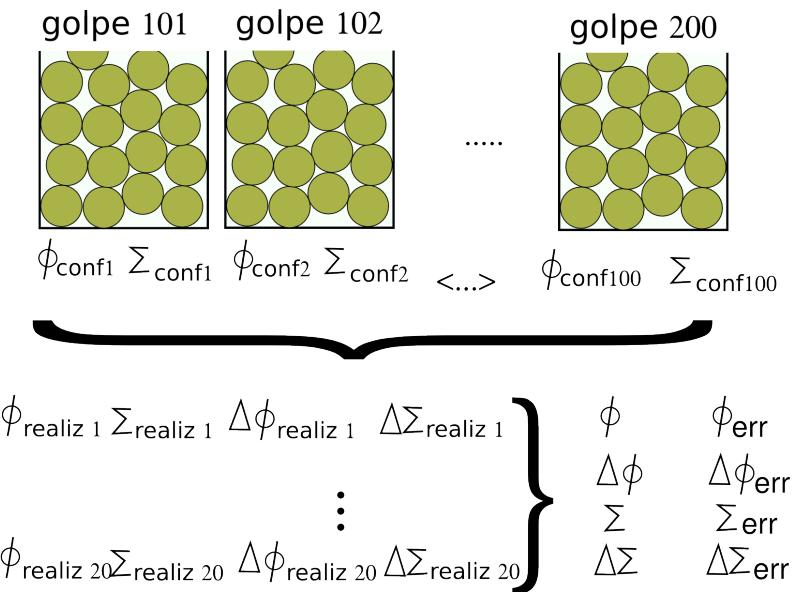


Figura 17.: Distintos pasos en el cálculo de las cantidades macroscópicas (ϕ y Σ) que definen el estado estacionario del sistema. ϕ_{conf} y \sum_{conf} corresponden al valor asociado a una dada configuración. ϕ_{realiz} , $\Delta\phi_{\text{realiz}}$, \sum_{realiz} y $\Delta\Sigma_{\text{realiz}}$ corresponden al valor medio y las fluctuaciones asociadas a una realización del estado estacionario. ϕ y $\Delta\phi$ (Σ $\Delta\Sigma$) son promedios sobre las diferentes realizaciones del estado estacionario.

Recordemos que por cada amplitud A utilizada se conservaron las últimas 100 configuraciones generadas, correspondientes al estado estacionario del sistema. Recordemos también que hemos repetido de forma independiente típicamente 20 veces todo el proceso. Los promedios no se realizaron sobre el total de las partículas del sistema, sino que se realizaron sobre regiones elegidas con un criterio particular que explicaremos en el capítulo siguiente.

La forma en que realizamos los promedios se encuentra esquematizada en la Fig. 15. Pueden verse los siguientes promedios (repetidos para cada amplitud analizada):

- Promediando los valores por partícula de ϕ (Σ) sobre las partículas dentro de la región de interés obtuvimos los valores medios asociados a la configuración ϕ_{conf} (Σ_{conf}).
- Estos valores ϕ_{conf} (Σ_{conf}) fueron promediados sobre las 100 configuraciones correspondientes al estado estacionario de una dada realización para obtener los valores medios ϕ_{realiz}

(Σ_{realiz}) de la repetición correspondiente. En este paso también obtuvimos los valores de las fluctuaciones $\Delta\phi_{realiz}$ ($\Delta\Sigma_{realiz}$), que fueron calculados a partir de la desviación estándar sobre las 100 configuraciones.

- Finalmente, el valor medio correspondiente al estado estacionario ϕ , $\Delta\phi$ (Σ , $\Delta\Sigma$) se obtiene de promediar las cantidades anteriores, ϕ_{realiz} y $\Delta\phi_{realiz}$ (Σ_{realiz} y $\Delta\Sigma_{realiz}$), para las 20 realizaciones. El error se calcula como la desviación estándar sobre las 20 realizaciones.

4

CONSIDERACIONES Y RESULTADOS PRELIMINARES

En este capítulo justificaremos los criterios que utilizaremos para realizar las medidas de las cantidades de interés.

En primer lugar mostraremos las diferencias que surgen de la implementación de una celda cuasi-bidimensional (como se explica en el Cap. 3) respecto de resultados previos, obtenidos en celdas estrictamente bidimensionales donde no existe la interacción de las partículas con las paredes frontal y posterior de la celda.

En segundo lugar discutiremos sobre la región del sistema donde llevar a cabo las medidas del tensor de esfuerzos Σ y la fracción de empaquetamiento ϕ .

Finalmente veremos que para bajas intensidades del pulso con que se perturba el sistema los valores medios, en el estado estacionario, ϕ y Σ no resultan bien definidos entre distintas realizaciones independientes del experimento. La interpretación de este fenómeno será retomada en el capítulo siguiente y en las conclusiones.

4.1 CONFINAMIENTO VS. DIMENSIONALIDAD

Mostraremos en esta sección las diferencias que surgen en la implementación de un modelo cuasi-bidimensional para la celda contenedora respecto de uno estrictamente bidimensional. En la Fig. 18 se muestran distintos resultados obtenidos aplicando el protocolo de perturbación explicado en el capítulo anterior a sistemas granulares contenidos en estos dos tipos de celda. Podemos ver en negro resultados correspondientes a una celda cuasi bidimensional, donde la interacción de las partículas es tanto entre ellas como con la base y las paredes laterales y frontales. El sistema está compuesto de un número $N = 500$ de partículas de diámetro d y la celda contenedora tiene un ancho $L = 13,4d$ y un espesor de $1,1d$. En el mismo gráfico (Fig. 18) podemos ver en rojo resultados correspondientes a un sistema estrictamente bidimensional (tomados de la Ref. [25]), donde las partículas son forzadas a moverse en un plano y sólo interactúan con las paredes laterales y la base de la celda. Este sistema está compuesto por una cantidad $N = 512$ de discos, y la celda posee un $L = 12,39d$. Las constantes de interacción (grano-grano y grano-pared) en ambos casos son las que se encuentran detalladas en la Tabla 3 y a ambos sistemas se les perturba con un pulso completo de onda seno, como el dado por la Ec. (23), con frecuencia angular $\omega = 25.2\pi\text{Hz}$ y amplitud A . En la Fig. 18 (a) se representa ϕ como función de la aceleración reducida Γ . En estos resultados, ϕ fue medida sobre un rectángulo de altura $H/2$ y ancho igual al de la celda contenedora, ubicado en el centro del sistema. Aquí H es la coordenada vertical de la partícula más alta en la configuración analizada. En el caso del sistema cuasi-bidimensional se utilizó el área de proyección de la esfera en el plano $x-z$. Podemos ver que las curvas en la Fig. 18 (a) resultan consistentes entre sí. Ambas curvas muestran un comportamiento no monótono como función de Γ . Ambas curvas se encuentran desplazadas en el gráfico, alcanzando un valor mínimo ϕ_{min} a distinto valor Γ , lo cual muestra que

las diferentes implementaciones del sistema (cuasi-bidimensional o estrictamente bidimensional) inducen cambios cuantitativos en los resultados medidos.

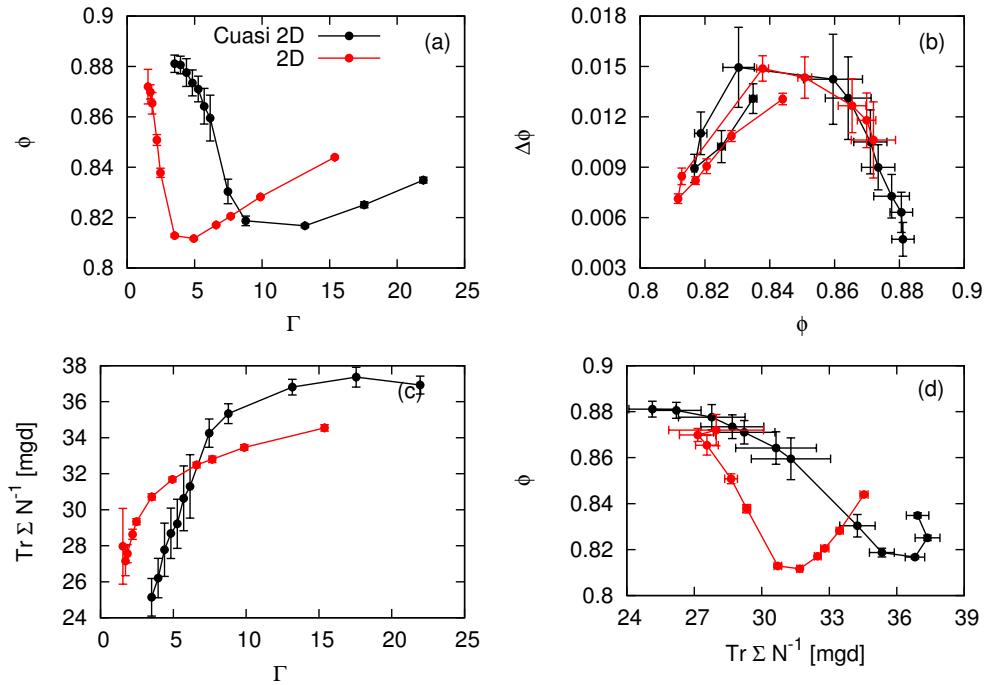


Figura 18.: Comparación de los resultados obtenidos para sistemas confinados en celdas estrictamente bidimensionales [25] (rojo) y en celdas cuasi-bidimensionales utilizadas en esta tesis (negro), de características (número de partículas, ancho de la celda) similares. (a) ϕ vs. A , (b) $\Delta\phi$ vs. ϕ (c) $\text{Tr}\Sigma$ vs. A , (d) $\Delta\text{Tr}\Sigma$ vs. $\text{Tr}\Sigma$.

En la Fig. 18 (b) se muestran (para los mismos sistemas anteriormente explicados) las fluctuaciones de densidad, $\Delta\phi$, como función de ϕ . El comportamiento cóncavo hacia abajo y la existencia de un máximo, reportadas en otros trabajos [25, 26], esta presente en ambas curvas.

En la Fig. 18 (c) se encuentra graficado el valor de la traza del tensor de esfuerzos $\text{Tr}\Sigma$ del sistema como función de Γ . Aquí la traza se consideró en ambos casos como la suma de las componentes Σ^{xx} y Σ^{zz} sin incluir, en el caso cuasi-bidimensional, la componente de Σ en la dirección perpendicular a las paredes frontales Σ^{yy} , ya que verificamos que resulta ordenes de magnitud menor a las otras componentes. En ambos casos el valor de $\text{Tr}\Sigma$ se obtuvo promediando sobre los valores de $\text{Tr}\Sigma$ obtenidos para cada una de las partículas del sistema, calculados mediante la Ec. (15). En ambas curvas de esta figura se aprecia un comportamiento monótono creciente de esta función, como fue reportado en [25].

Finalmente, en la Fig. 18 (d) se encuentra graficado el valor de ϕ como función de $\text{Tr}\Sigma$ para los dos tipos de celdas estudiadas. Vemos que en este caso también, ambos resultados se muestran consistentes cualitativamente, aunque no cuantitativamente, encontrándose las curvas desplazadas una respecto a la otra.

Vemos así que la implementación de un modelo de celda cuasi-bidimensional induce diferencias en los valores de las variables macroscópicas (ϕ, Σ), aunque mantiene su comportamiento cualitativo.

La comparación en la Fig. 18 sirve de validación independiente de los resultados obtenidos en esta tesis. Mientras que estas simulaciones fueron realizadas con el paquete LAMMPS [53], las de la Ref. [25] fueron hechas con una implementación propia.

El estudio del comportamiento de $\text{Tr}\Sigma$ será un elemento importante de la presente tesis. Por lo expuesto en el capítulo anterior respecto a las configuraciones experimentales utilizadas en los trabajos con los que usualmente realizamos comparaciones de nuestros resultados numéricos, mantendremos en esta tesis la configuración cuasi-bidimensional, con las características descritas en el capítulo anterior.

4.2 REGIÓN DE ANÁLISIS

Las medidas de ϕ o Σ no se realizarán considerando todas las partículas del sistema, sino que promediaremos sólo sobre partículas ubicadas dentro de una región específica.

Lo primero que resulta necesario tener en cuenta es que ni ϕ ni Σ son funciones homogéneas respecto de la profundidad del sistema. Esto es debido, entre otras cosas, a la presencia del campo externo impuesto por la gravedad. En la Fig. 19 graficamos los valores de ϕ y $\text{Tr}\Sigma$ medidos sobre franjas rectangulares horizontales de ancho igual al del sistema y de espesor $1,0d$ a diferentes profundidades H . El parámetro H indica la distancia de estas capas (en unidades de diámetros de partículas) respecto de la superficie libre de la columna de granos. En la Fig. 19 (a) vemos la función ϕ vs H para dos sistemas con diferente altura de columna de granos $h_1 \approx 20d$ y $h_4 = 4 \times h_1$. Vemos que esta función no resulta constante y puede apreciarse, por ejemplo, que presenta regiones de altas densidades cerca de la base de la celda. Esta inhomogeneidad de ϕ con H ya había sido observada por otros autores en trabajos previos [41]. Podemos ver en la misma figura que el comportamiento de ϕ no depende sólo de la profundidad H sino también de la altura del sistema. En la Fig. 19 (b) podemos ver el comportamiento de $\text{Tr}\Sigma$ como función de H para los mismos dos

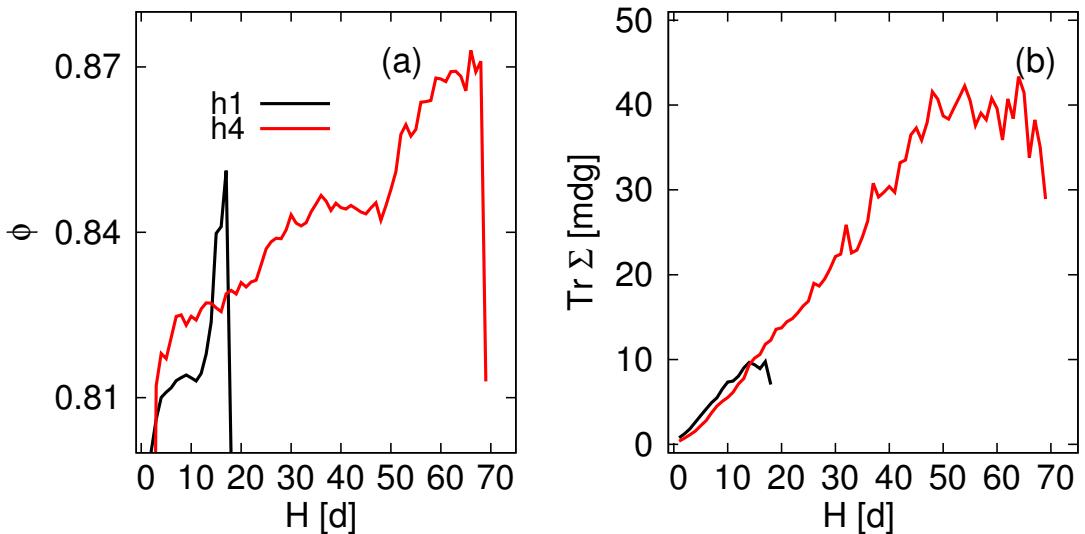


Figura 19.: (a) Valores de ϕ , medidos sobre franjas horizontales de $1d$ de espesor, en función de la distancia H de esta franja a la superficie libre de la columna de granos. Se grafican resultados correspondientes a dos sistemas de diferente altura ($h_1 \approx 20d$ negro, $h_4 = 4 \times h_1$ rojo). Puede verse que los valores alcanzados en cada sistema no resultan iguales, aún medidos a la misma profundidad H . (b) Lo mismo que (a) pero para $\text{Tr}\Sigma$. Vemos que cerca de la superficie esta magnitud muestra un comportamiento lineal con H pero que, para sistemas suficientemente altos (curva roja) este valor satura como lo predice el efecto Janssen [17].

sistemas que los representados en la Fig. 19 (a). En regiones cercanas a la superficie $\text{Tr}\Sigma$ presenta

un comportamiento aparentemente lineal con H . Para sistemas suficientemente altos $\text{Tr}\Sigma$ presenta una saturación que concuerda con lo que predice el efecto Janssen [17] (ver Cap. 1).

A partir de las observaciones previas, se ve la necesidad de realizar las medidas sobre capas angostas del sistema. La elección de la forma en que deben considerarse estas capas, sin embargo, no resulta trivial. Como el objetivo de la presente tesis es poder comparar propiedades entre sistemas de diferente tamaño, necesitamos utilizar capas de medición que permitan esta comparación. Por este motivo las capas utilizadas serán tomadas a la misma profundidad respecto de la superficie en todos los sistemas. Sin embargo la forma de la superficie libre de la columna de granos no resulta generalmente horizontal. Aunque para sistemas angostos esta inclinación resulta despreciable, como puede apreciarse en la Fig. 20 (a), en la Fig. 20 (b) vemos que esta inclinación se vuelve más pronunciada a medida que se ensancha la celda contenedora. Hemos realizado numerosos análisis preliminares que indican que la inclinación de la superficie libre afecta fuertemente a las mediciones de ϕ y $\text{Tr}\Sigma$ en capas horizontales. En el caso particular de la variable Σ esta dependencia resulta comprensible debido a la presencia del campo externo y al hecho de que, para sistemas como el representado en la Fig. 20 (b), partículas que posean una misma coordenada z , respecto de la base de la celda, soportaran distinta cantidad de material por encima de ellas.

Por lo expuesto, en esta tesis utilizaremos como región de análisis capas angostas que acompañen la forma de la superficie libre de la columna granular. En la Fig. 20 (b) vemos un ejemplo de este tipo de capa representada por las partículas resaltadas en negro. El método que utilizaremos para determinar el perfil de la superficie libre de la columna de granos consistirá en discretizar en valores enteros de x/d la coordenada horizontal de la celda y encontrar luego la partícula de mayor coordenada z correspondiente cada sección. Luego definimos las capas de medición ubicando el centro de estas capas a la misma profundidad C elegida para cada sección discreta a lo ancho de la celda. Realizaremos las medidas, tanto de ϕ como de Σ , promediando sobre los valores por partícula de las partículas cuyos centros se encuentren a una distancia menor que $e/2$ (donde e es el ancho nominal de la capa) del centro de la capa para la sección vertical correspondiente. No consideraremos partículas a una distancia menor que $2d$ de las paredes laterales, ya que, como dijimos en el capítulo anterior, estas partículas poseen una densidad local menor que las del interior del sistema.

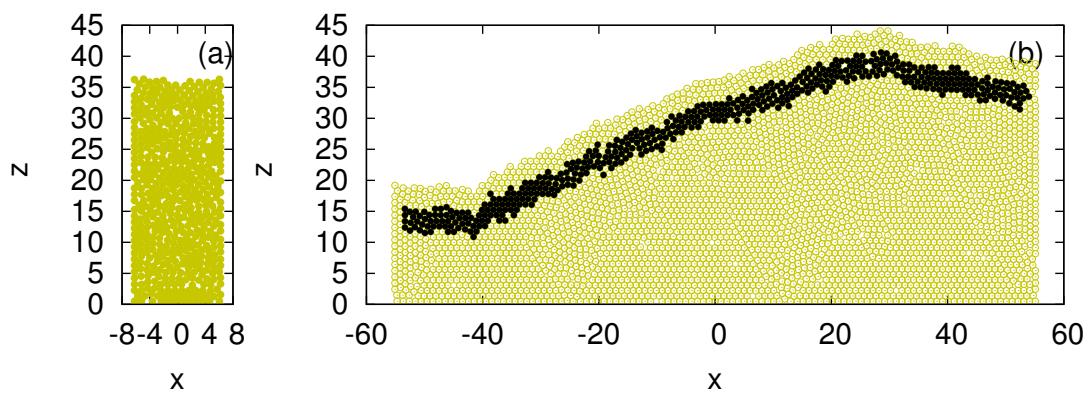


Figura 20.: Configuraciones estáticas típicas donde puede verse el cambio en la inclinación de la superficie libre de la columna de granos para sistemas de anchos (a) $L = 13,4d$ y (b) $L = 111,2d$. En (b) las partículas resaltadas en negro pertenecen a la región de análisis considerada. Esta región corresponde a una capa que acompaña la forma del perfil de la superficie libre de la columna de granos, a una profundidad $C = 5d$ de la superficie y con un espesor $e = 5d$. La capa de medición excluye a las partículas cuyos centros se encuentran a menos de $2d$ de las paredes laterales.

Para la elección del espesor e de la capa tuvimos que tener en consideración que las propiedades que vamos a analizar no resultan homogéneas en el sistema sino que, como vimos en las Fig. 19 (a) y (b), presentan una gran dependencia con la profundidad donde son medidas.

En la Fig. 21 vemos la dependencia que presentan ϕ y Σ con la elección de la profundidad C y el espesor e de la capa de análisis. En la Fig. 21 (a) graficamos ϕ vs. Γ (promediando sobre las 20

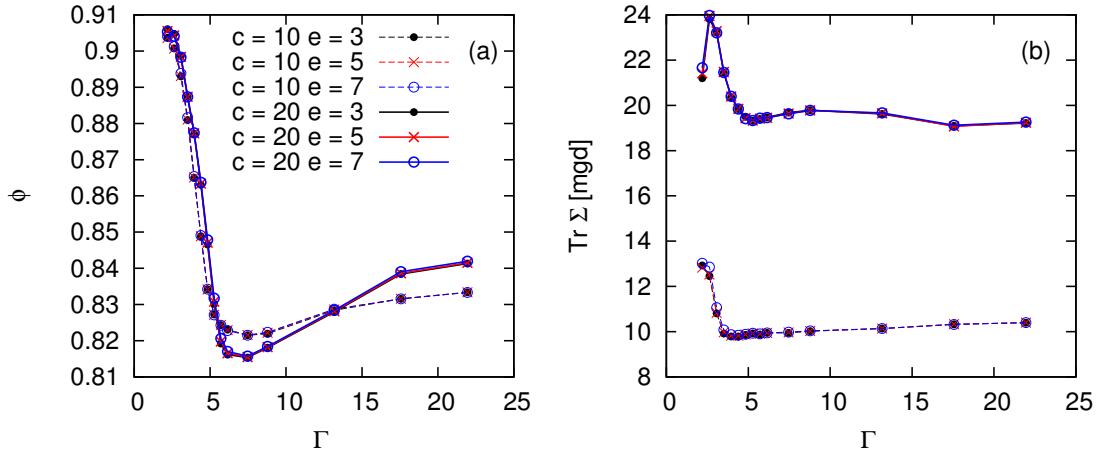


Figura 21.: Valores de (a) ϕ y (b) $\text{Tr}\Sigma$ vs. Γ medidos utilizando distintos valores de C y e para las capas de análisis. Puede apreciarse en ambos gráficos que si se mantiene constante C y se modifica el valor de e de la capa, las medidas resultan equivalentes. Si modificamos en cambio la profundidad C donde se ubica la capa de medición, las distintas curvas dejan de coincidir. Se aprecia sin embargo en (a) que para distintos valores C los resultados son cualitativamente consistentes, mientras que en (b) vemos que la variación de C induce cambios en $\text{Tr}\Sigma$ tanto cuantitativos (debido a la presencia del campo externo g) como cualitativos. Esos resultados fueron obtenidos sobre un sistema de ancho $L = 55,6d$ y con un número de partículas $N = 2000$ y corresponden a los valores medios sobre las 20 realizaciones independientes, como se explicó en el capítulo anterior.

realizaciones independientes como explicamos en el capítulo anterior), tomando distintas combinaciones de C y e . Vemos que ϕ no presenta fuerte dependencia con e , aunque presenta variaciones cuantitativas al variar C . El comportamiento de los resultados correspondientes a distinto C , sin embargo, es cualitativamente similar. En la Fig. 21 (b) vemos el comportamiento de $\text{Tr}\Sigma$ como función de C y e . Los valores de Σ vs. Γ no presentan dependencia con e si se mide a un mismo C . Sin embargo puede observarse que la dependencia de Σ con la profundidad C de la capa no es sólo cuantitativa (lo que era evidente debido a la existencia del campo externo g), sino que presentan comportamientos cualitativamente diferentes al variar C . Esto es razonable por la existencia del efecto Janssen [17] que hace que la presión en la base no resulte lineal con la cantidad de material contenido. Como hemos mostrado en el trabajo [16] y se ha discutido también en [18], la forma en que el sistema alcanza esta saturación depende de la historia de movilización que sufre el sistema respecto de las paredes de la celda, por lo que es razonable que el perfil de Σ resulte dependiente de la intensidad del golpe. No realizaremos aquí un estudio exhaustivo de esta dependencia, ya que nuestro objetivo central es el de poder realizar comparaciones entre medidas sobre diferentes sistemas.

Realizaremos las medidas sobre capas relativamente superficiales, donde el comportamiento del tensor de esfuerzos es todavía lineal con la altura de la columna de granos (ver Fig. 19). Típicamente $C = 10$ y en todos los casos el ancho de los sistemas estudiados será mayor a $13d$. Dada la poca dependencia del valor medio de estas cantidades con e , utilizaremos capas angostas ($e = 3$) en la mayoría de los casos. Esto nos permitirá en gran medida evitar en el análisis partículas cercanas a

la base en columnas de baja altura. Al igual que sucede con partículas en contacto con los laterales, las cercanas a la base introducen efectos de borde en la medición de ϕ . Para los sistemas de menor altura analizados utilizaremos capas centradas en $C = 3$, manteniendo $e = 3$, ya que hemos verificado que tomando $C = 10$ se incorporan en el análisis muchas partículas en contacto con la base.

Remarcaremos finalmente que esta implementación de la región de análisis no resulta trivial. Otros trabajos la han implementado de distintas maneras; por ejemplo con capas horizontales. Realizamos intentos iniciales utilizando capas de análisis horizontales y esto produjo resultados inconsistentes. Por ejemplo, la medida de una cantidad en una capa arrojaba valores diferentes y sin tendencia definida al considerar sistemas con igual altura de columna de granos pero en celdas de anchos crecientes. Esto se debe al cambio en la inclinación de la superficie libre al incrementar el ancho L de la celda.

Utilizando el tipo de capas descrito en esta sección fuimos capaces, como lo mostraremos en el capítulo siguiente, de realizar comparaciones consistentes entre resultados obtenidos en sistemas de diferente tamaño.

4.3 RUPTURA DE ERGODICIDAD

En esta última sección discutiremos acerca del comportamiento de las variables ϕ y Σ a bajas intensidades de golpes.

En esta tesis definimos, como explicamos en el capítulo anterior (Cap. 3), los valores en el estado estacionario de las variables macroscópicas del sistema a partir de promediar los valores obtenidos en cada una de las realizaciones independientes realizadas. Es decir, para cada una de las realizaciones del “experimento” obtuvimos valores medios de ϕ y Σ en el estado estacionario y los promediados para obtener el valor que asociamos al estado.

En la Fig. 22 (a) vemos graficados resultados correspondientes a ϕ_{realiz} vs. Γ para 6 de las 20 realizaciones independientes llevadas a cabo. Las barras de error de estas curvas corresponden a la desviación estándar de los distintos valores de ϕ_{conf} para la realización. Podemos apreciar que para altas intensidades las distintas curvas graficadas resultan consistentes dentro de la barra de error, indicando que es posible, a partir de promediar sobre estos valores, obtener un valor bien definido para ϕ en el estado estacionario. Sin embargo, para bajas intensidades de golpe, estas curvas no resultan consistentes y sus valores se alejan unos de otros (como podemos ver en forma ampliada en el recuadro interior de la Fig. 22(a)). Esto indica que no es correcto realizar un promedio sobre los distintos valores de ϕ_{realiz} ; es decir, el valor de ϕ en el estado no resulta bien definido para estas intensidades.

En la Fig. 22 (b) vemos $Tr\Sigma_{realiz}$ vs. Γ correspondientes a las mismas 6 repeticiones independientes del experimento analizadas en a Fig. 22 (a). En este gráfico resulta mucho más evidente que en el caso de ϕ la diferencia existente a bajas intensidades de pulso en los valores de Σ en cada una de las realizaciones independientes.

Los resultados en las Figs. 22 (a) y (b) sugieren que existe un cambio en la forma en que el sistema recorre los estados compatibles con la perturbación aplicada para distintas intensidades. Para bajas amplitudes, esta forma de recorrer las configuraciones no puede considerarse ergódica. Es decir, el sistema queda atrapado en diferentes regiones reducidas del espacio de fases, dependiendo de la historia en que el estado es alcanzado. Las fluctuaciones de los parámetros macroscópicos ϕ y Σ en estos estados resultan pequeñas, como consecuencia de que el sistema recorre sólo configuraciones cercanas. A altas Γ es posible definir un valor medio de las variables asociados a cada una

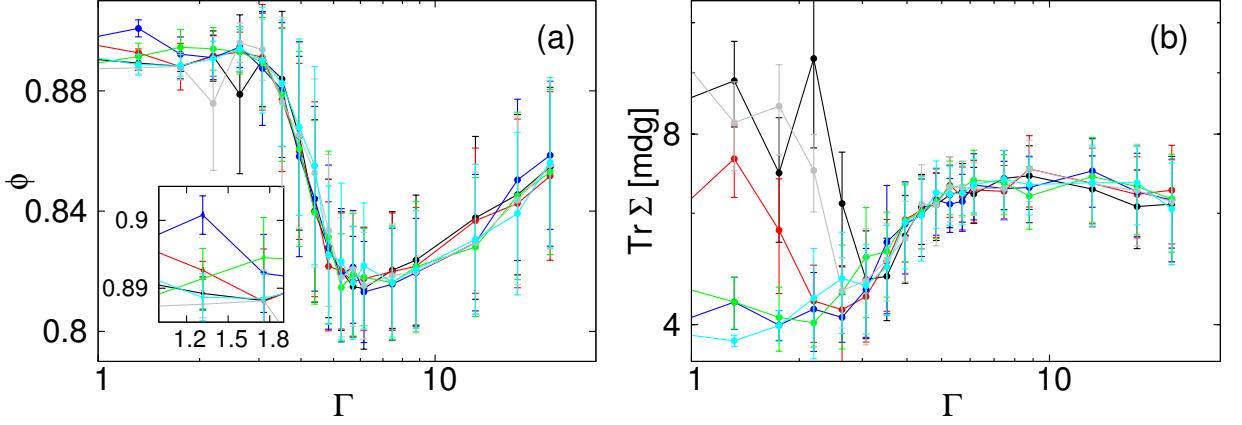


Figura 22.: (a) Valores medios de ϕ_{realiz} vs. Γ calculados sobre repeticiones independientes. (b) ídem pero para $\text{Tr}\Sigma_{realiz}$ vs. Γ . Las barras de error corresponden a la desviación media de los valores de ϕ_{conf} correspondientes a las configuraciones recorridas por el sistema para cada realización. Puede verse que para pequeñas amplitudes los valores medios de estas cantidades no resultan bien definidos, ya que no se encuentran contenidos dentro de las barras de error asociadas. Estos resultados fueron obtenidos midiendo sobre un sistema confinado en una celda de ancho $L = 13,4d$ y $N = 500$ partículas.

de las realizaciones, y puede sugerirse que las configuraciones en estos estados estacionarios son recorridas de forma ergódica. Este tipo de comportamiento ya había sido reportado por Paillusson y Frenkel en el trabajo [6]. En dicho trabajo sin embargo, sólo se estudia la ruptura de ergodicidad observando el comportamiento de ϕ , sin considerar la variable Σ . La Fig. 22 sugiere que el valor de Γ para el cuál el sistema deja de ser ergódico es diferente para ϕ que para Σ , pudiendo tener estados con densidad media bien definida entre realizaciones, pero que esto no suceda así con el tensor de esfuerzos. Además, la diferencia existente entre los valores de $\text{Tr}\Sigma$ para las distintas repeticiones independientes es fácilmente apreciable si se compara con los datos de ϕ . Es por esto que recomendamos en esta tesis la utilización de Σ para la determinación de los regímenes ergódicos y no-ergódicos del sistema. Esta propuesta la complementaremos en el capítulo siguiente con análisis detallados del movimiento de los granos.

Es importante tener en cuenta que la mayoría de los trabajos en el área [19, 22–24] realizan investigaciones en regímenes de intensidades de pulso mucho menores a las que aquí utilizaremos. Estos autores parecen enfocarse en un régimen donde no está garantizada la ergodicidad. Aún así los trabajos reportan que los resultados de ϕ son reproducibles en realizaciones independientes. No ahondaremos en esa discusión, pero volveremos brevemente sobre esto en el capítulo dedicado a las conclusiones.

4.4 RECAPITULACIÓN

En virtud de los análisis preliminares de este capítulo, en el capítulo siguiente, dedicado a los resultados principales de esta tesis, utilizaremos sistemas cuasi-bidimensionales. Realizaremos las medidas utilizando una región angosta que acompañe el perfil de la superficie libre (no horizontal) de la columna de granos y limitaremos el análisis a los valores de Γ en los que el valor medio en el estado estacionario tanto de ϕ como de Σ resulte definido y reproducible.

RESULTADOS: EFECTOS DEL TAMAÑO DEL SISTEMA

En este capítulo mostraremos y discutiremos los resultados obtenidos. Hablaremos de los efectos del tamaño del sistema sobre las variables macroscópicas ϕ y Σ y sus correspondientes fluctuaciones. Utilizaremos los métodos de análisis presentados en las secciones previas y mostraremos que es posible realizar comparaciones cuantitativas de las magnitudes estudiadas entre los distintos sistemas. A partir de estas comparaciones veremos que es posible determinar un ancho mínimo para la celda contenedora a partir del cuál tanto ϕ como Σ se vuelven independientes del ancho del sistema y devienen funciones sólo de la altura de la columna de granos. Veremos así mismo que para el ancho mínimo encontrado, las fluctuaciones tanto de ϕ como de Σ , escalan con el número de partículas en la región de análisis de la forma que establece la mecánica estadística (Ec. (11)). Esto indica que para estos tamaños de sistema dejan de ser apreciables las correlaciones entre subsistemas reportadas por otros autores [32]. Propondremos un escalado sobre los valores obtenidos de ϕ para distintas alturas de sistema que permite hacer coincidir las curvas obtenidas en una misma curva. Mostraremos que este escalado no resulta apropiado para escalar el comportamiento de Σ . Veremos por lo tanto que los resultados obtenidos en sistemas de diferente altura se encuentran desplazados en el espacio de fases ϕ - Σ . Esto permitirá apreciar de forma clara que es posible encontrar estados del sistema que presenten iguales valores de ϕ y distinto valor de Σ o viceversa. Finalizaremos el capítulo con una discusión sobre la teoría de la mecánica estadística de Edwards [28] a la luz de los resultados de esta tesis.

5.1 TAMAÑOS DE SISTEMAS ANALIZADOS

En la Fig. 23 podemos ver los tamaños correspondientes a las distintas celdas analizadas. Estos mismos valores se encuentran resumidos en la Tabla 4. Variamos tanto el ancho L de la celda como el número N de partículas en su interior. En adelante, para identificar a cada uno de estos sistemas indicaremos el ancho L de la celda y la altura nominal h de la columna

$$h = \text{int}(Nd^2/L). \quad (24)$$

Este valor así definido no es estrictamente la altura del sistema (la que depende de la densidad de la columna de granos); es sin embargo una nomenclatura simplificada. Así, cuando nos refiramos al sistema $L1-h1$, la Tabla 4 indica que se trata de una celda de ancho $13,4d$ con una columna de granos de aproximadamente $17d$. Podemos ver que existen conjuntos de sistemas que pueden asociarse a la misma altura nominal h y conjuntos de sistemas que pueden asociarse al mismo ancho L de celda.

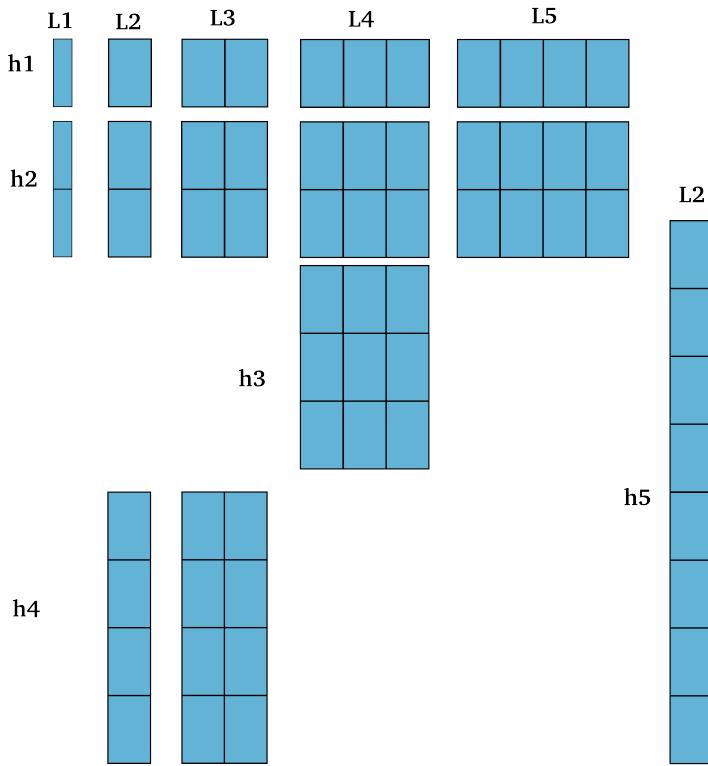


Figura 23.: Esquema de los distintos tamaños de celda utilizados en la presente tesis. Estos mismos valores se encuentran resumidos en la Tabla 4.

	$h_1 = 17d$	$h_2 = 35d$	$h_3 = 53d$	$h_4 = 71d$	$h_5 = 140d$
$L_1 = 13,4d$	X	X			
$L_2 = 27,8d$	X	X		X	X
$L_3 = 2 * L_2$	X	X		X	
$L_4 = 3 * L_2$	X	X		X	
$L_5 = 4 * L_2$	X	X			

Tabla 4.: Ancho L de la celda y altura nominal h (Ec. 24) de la columna de partículas correspondientes a cada uno de los sistemas analizados. Las X indican los pares $L-h$ estudiados. Cada sistema será definido a partir de su par $L-h$ correspondiente.

Los valores de L que se eligieron en cada caso no son commensurables con el diámetro de los granos. Esto permite disminuir la tendencia a la cristalización que se ha observado al perturbar sistemas bidimensionales a bajas intensidades.

Las regiones de análisis empleadas corresponden, a menos que se especifique otra cosa, a capas que se ubican a $10d$ de profundidad desde la superficie libre de la columna de granos, y tienen un espesor de $3d$, siguiendo el criterio indicado en el capítulo anterior. Esto es, la capa sigue el contorno de la superficie libre y excluye una región de ancho $2d$ contigua a cada pared lateral de la celda.

5.2 FRACCIÓN DE VOLUMEN OCUPADO

En la Fig. 24 (a) podemos ver ϕ en función de Γ del golpe aplicado para los distintos sistemas analizados. Las Figs. 24 (b) y (c) muestran sólo los resultados correspondientes a sistemas con $h = h_2$ y $h = h_4$, respectivamente, para distintos anchos de celda. La Fig. 24 (d) muestra resultados correspondientes a $L = L_2$ para distintas alturas h .

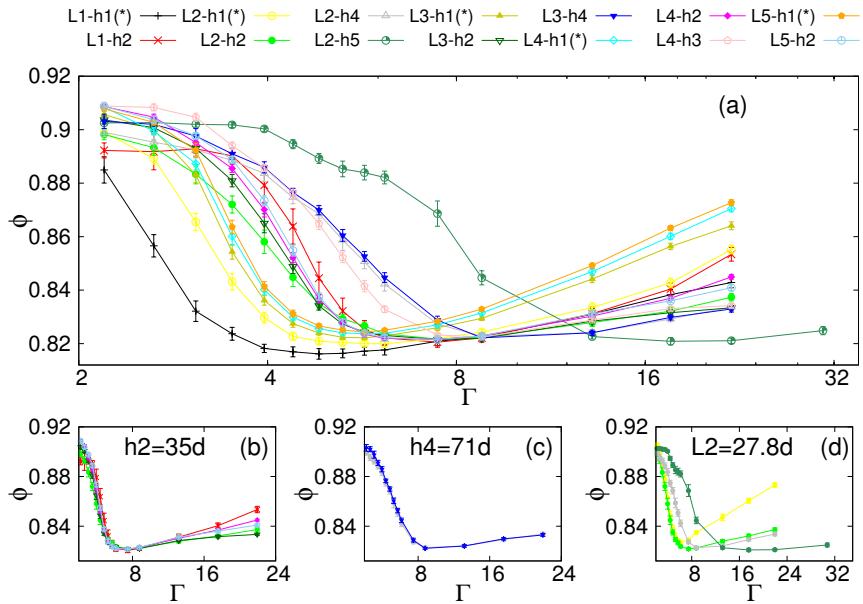


Figura 24.: Fracción de compactación ϕ en el estado estacionario en función de Γ del golpe aplicado. (a) Todos los sistemas analizados. Para evitar efectos espúreos producidos por promediar sobre áreas de Voronoi de partículas en contacto con la base de la celda, en los sistemas correspondientes a $h = h_1$ se utilizó una capa de medición ubicada a $3d$ de profundidad desde la superficie. (b) Resultados correspondientes sólo a $h = h_2$. (c) Resultados correspondientes sólo a $h = h_4$. (d) Resultados correspondientes sólo a $L = L_2$.

El comportamiento de ϕ vs. Γ resulta no monótono en todos los casos. Vemos (Fig. 24 (b) y (c)) que sistemas con el mismo valor h alcanzan un valor mínimo en la fracción de empaquetamiento ϕ_{min} al un mismo valor de Γ . La posición de ϕ_{min} se desplaza, sin embargo, a mayores valores de Γ a medida que el sistema se hace más alto (Fig. 24 (d)). Esto sugiere una dependencia de los valores de ϕ alcanzados con la altura h de la columna de granos, independientemente del ancho L de la celda. Veremos en las siguientes secciones que, sin embargo, el L de la celda afecta de forma más marcada el comportamiento tanto de Σ como de las fluctuaciones de ϕ y Σ .

Existen discusiones [35, 36] acerca de la necesidad de definir un parámetro diferente de Γ que permita comparar resultados, ya sea sobre sistemas perturbados de diferentes formas (pulsos con diferente ω o no sinusoidales) o sobre sistemas diferentes. Nosotros utilizamos aquí el criterio utilizado en la Ref. [14], adaptado para intentar comparar los resultados obtenidos con sistemas de diferente h . Allí, para comparar resultados obtenidos mediante modelos granulares muy diferentes entre sí, se utilizó como parámetro característico la expansión ϵ máxima inducida durante la perturbación. Esta se calculó (suponiendo que el sistema se expandía de forma homogénea y ocupaba todo el nuevo área accesible resultante de la elevación del centro de masas) como el cociente entre la altura máxima h_{max} alcanzada por el centro de masas durante el vuelo de las partículas al

ser golpeado el sistema y la altura inicial h_0 del mismo en su configuración mecánicamente estable inmediatamente anterior. Esto es, $\epsilon = h_{max}/h_0$. Esto no deja de ser una simplificación, pero mostraremos que resulta útil para el fin buscado.

En el siguiente análisis mantendremos por simplicidad la aproximación de que el sistema se expande de forma homogénea al ser golpeado. Teniendo en cuenta que el sistema se “despegá” de la base de la celda cuando su aceleración alcanza el valor de la aceleración de la gravedad g y que el movimiento realizado por el centro de masas a partir de ese momento puede aproximarse por un tiro vertical (despreciando las colisiones entre partículas y el roce con las paredes) podemos calcular la altura máxima que el centro de masas del sistema alcanzará. A partir de la forma de la perturbación dada en la Ec. (23), el tiempo t que le lleva al sistema alcanzar la aceleración g se obtiene de la relación

$$g = A\omega^2 \operatorname{sen}(\omega t). \quad (25)$$

donde A es la amplitud del pulso aplicado. Puede comprobarse en nuestras simulaciones que esta condición se cumple de forma casi inmediata una vez comenzado el movimiento (debido al valor de $\omega = 2\pi 30\text{Hz}$ utilizado). Por esto, la velocidad de despegue puede tomarse aproximadamente igual a ωA . Con esta velocidad de despegue resulta $h_{max} = h_0 + (A\omega)^2/(2g)$ y la expansión ϵ del sistema

$$\epsilon = h_{max}/h_0 = 1 + \frac{(A\omega)^2}{(gh)}, \quad (26)$$

donde utilizamos $h_0 \simeq h/2$, siendo h la altura nominal de la columna de granos.

El la Fig. 25 se muestran los valores de ϕ de la Fig. 24 (a) representados como función de ϵ . Se

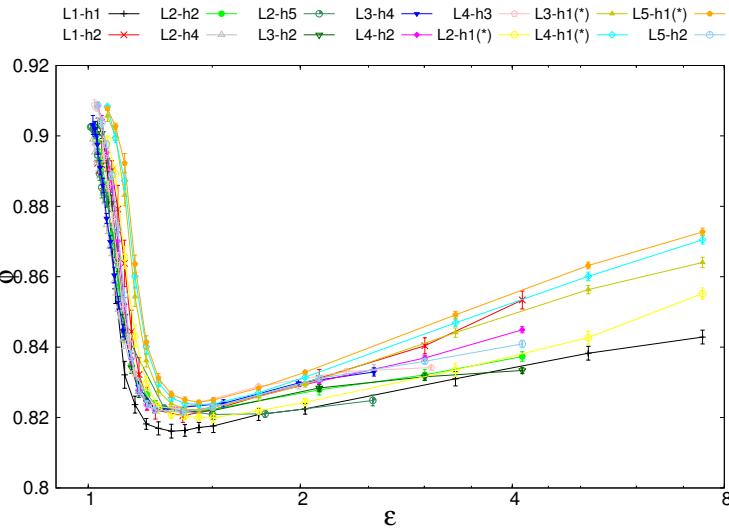


Figura 25.: ϕ en función de la expansión efectiva ϵ inducida en el sistema, calculada utilizando la Ec. (26). Se respeta el código de símbolos y colores de la Fig. 24.

puede observar que en todos los casos la posición del ϕ_{min} resulta ahora coincidente y las curvas que anteriormente se mostraban dispersas parecen corresponder ahora a una misma curva maestra. Para altas amplitudes vemos sin embargo que las curvas siguen presentando diferencias. Esto puede deberse a que utilizamos la hipótesis de expansión homogénea aunque sabemos que realmente la expansión no resulta homogénea, debido, entre otras cosas, a las colisiones que se producen entre

los granos durante la propagación del pulso. La velocidad de despegue real de las partículas depende entonces de la profundidad de estas en el sistema. Este nivel de detalle, no obstante, no es el objetivo del presente estudio.

Remarcaremos aquí que este tipo de acuerdos de las funciones ϕ vs. ϵ para los distintos sistemas no resultaba posible cuando las capas de medición se toman horizontales (no siguiendo la forma del perfil de la superficie explicada en el capítulo anterior). Esto es debido principalmente a que para sistemas cada vez más anchos, tomar regiones de análisis sobre capas horizontales genera que se incluyan en el cálculo partículas de la superficie que, al igual que las partículas de la base y los laterales, poseen una densidad local mucho menor que el resto de las partículas en el sistema. Con la implementación de capas de medición que acompañan la forma de la superficie libre del sistema y, bajo las hipótesis utilizadas para dar una forma funcional a ϵ , hemos sido capaces hasta aquí de compatibilizar resultados a priori diferentes, ya que fueron obtenidos sobre sistemas de diferente tamaño.

A continuación discutiremos la compatibilidad del parámetro ϵ encontrado con el parámetro propuesto por Dijksman et al. [35], y mostraremos un ejemplo de la aplicación del parámetro ϵ propuesto, realizando una comparación entre resultados numéricos propios y los resultados experimentales reportados por dichos autores.

5.3 COMPARACIÓN CON EXPERIMENTOS 3D

Mostraremos aquí, como soporte al valor del uso del parámetro ϵ como medida de la intensidad efectiva del pulso, resultados preliminares obtenidos sobre simulaciones tridimensionales comparados con los resultados experimentales (también 3D) reportados por Dijksman et al.

Debido al mayor tiempo computacional que requiere el estudio de sistemas tridimensionales, el estudio numérico ha sido generalmente relegado. Mostraremos aquí, sin embargo, resultados preliminares obtenidos en este trabajo que nos permiten realizar comparaciones con resultados experimentales.

Simulamos un sistema confinado en una celda rectangular de base cuadrada ($L = 10,3d$), con altura nominal $h = 40d$. Aplicamos al sistema el mismo protocolo de perturbación que a los sistemas quasi bidimensionales. Comparamos los resultados ϕ vs. ϵ obtenidos, con los resultados experimentales reportados en la Ref. [35]. Los autores del mencionado trabajo aplican un protocolo de pulsos similar al explicado pero en el que varían, además de la amplitud A , la frecuencia angular $\omega = 2\pi/T$ de la perturbación (aquí T es el periodo). Utilizan un sistema experimental consistente en una celda cilíndrica de 26mm de diámetro que contiene partículas esféricas de vidrio (de diámetro bi-disperso $d_1 = 1,6\text{mm}$, $d_2 = 2,3\text{mm}$, en proporciones iguales). La altura de la columna h de granos en este sistema era aproximadamente 10cm. Si suponemos para las partículas un diámetro promedio ($d = d_1 + d_2)/2 \approx 2\text{mm}$, entonces $h \approx 50d$).

Consiguen de esta forma, variando A y ω , una familia de curvas en el plano $\phi-\Gamma$, cualitativamente similares a las reportadas por trabajos previos [19, 22] pero que se encuentran desplazadas entre sí. En la Fig. 26 (a) podemos ver las curvas reportadas por dichos autores y la comparación realizada con resultados numéricos propios. Puede verse que las tres curvas representadas se encuentran desplazadas entre sí. Los autores proponen para colapsar estas curvas la utilización del parámetro ΓT . En la Fig. 26 (b) puede verse el mismo conjunto de curvas que en la Fig. 26 (a) pero representadas en función del parámetro ΓT . Podemos apreciar que los resultados extraídos de la Ref. [35] (que corresponden a sistemas con la misma altura) colapsan como función de este parámetro pero no colapsan con los resultados numéricos, que han sido obtenidos con distinto ω y corresponden a un

sistema con distinto h . En la Fig. 26 (c) se encuentra la representación de estos mismos resultados en función del parámetro ϵ propuesto en esta tesis. Puestos en función del parámetro ϵ las distintas curvas correspondientes a sistemas con distinta altura h y a perturbaciones de distinta ω muestran un muy buen acuerdo cualitativo y cuantitativo. Este es un resultado importante ya que indica que el uso de ϵ permite comparar cuantitativamente los resultados hallados con sistema de diferentes tamaños sometidos a perturbaciones diferentes. Más allá de las simplificaciones introducidas en la estimación de la expansión efectiva ϵ , esta forma de representación permitiría predecir el valor de ϕ en el estado estacionario, para cualquier tamaño de sistema y tipo de pulso aplicado, conociendo los valores correspondientes a un sistema de tamaño arbitrario.

Pudimos verificar que el parámetro ΓT es compatible con el parámetro ϵ que aquí proponemos ya que, escrito en función del periodo de la onda T , ϵ toma la forma

$$\epsilon = [\Gamma T / (2\pi)]^2 (g/h) + 1. \quad (27)$$

Para columnas de igual altura h (como las usadas en la Ref. [35]) ambos parámetros permiten colapsar los resultados de ϕ obtenidos con diferente ω .

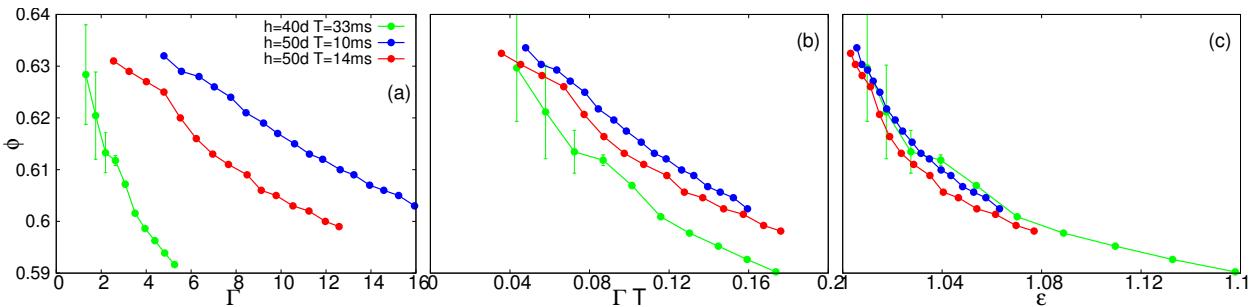


Figura 26.: ϕ vs. Γ (a), ΓT (b), ϵ (c), comparando resultados correspondientes a sistemas 3D de diferentes alturas h . La curva verde corresponde a resultados propios, simulados sobre una caja rectangular de base cuadrada y una altura de columna de granos $h \simeq 40d$. Las curvas azul y roja corresponden a datos extraídos del trabajo [35] para un sistema de esferas de vidrio (de diámetros bi-dispersos $d_1 = 1,6$ y $d_2 = 2,3$ mm) en una celda cilíndrica de 26cm de diámetro. Si consideramos un diámetro promedio de las partículas $d \approx 2$ mm, podemos suponer $h \approx 50d$.

Mencionaremos por último que el trabajo de la Ref. [35] utilizó para la medición de ϕ , técnicas de absorción de rayos γ sobre una región horizontal angosta de la columna de granos y no sigue el método propuesto en la presente tesis de medición por capas que acompañen el perfil de la superficie libre de los granos. Sin embargo, debido a que para sistemas tridimensionales el efecto de la inclinación de la superficie requiere sistemas de mayor ancho para ser apreciado que en sistemas bidimensionales, es posible comparar los resultados, obteniendo un buen acuerdo como lo hemos hecho. No nos resultó posible, sin embargo, realizar aquí la comparación con los datos experimentales originales del Experimento de Chicago [19]. Los valores de ϵ utilizado en ese trabajo (debido a la gran altura $h \approx 80$ cm $\approx 400d$ del sistema utilizado) resultaban muy pequeños y no presentan casi solapamiento con el rango de ϵ en nuestras simulaciones.

5.4 FLUCTUACIONES DE ϕ

En la Fig. 27 se muestra el comportamiento de las fluctuaciones de la fracción de volumen ocupado $\Delta\phi$ como función de ϕ . Recordamos que $\Delta\phi$ se calcula a partir del promedio sobre los $\Delta\phi_{realiz}$ de cada repetición independiente. Las barras de error en la Fig. 27 fueron calculadas mediante la desviación estándar de estos valores utilizados para calcular el promedio, como explicamos en el Cap. 3. Podemos ver que todas estas curvas resultan cóncavas hacia abajo, alcanzando un valor

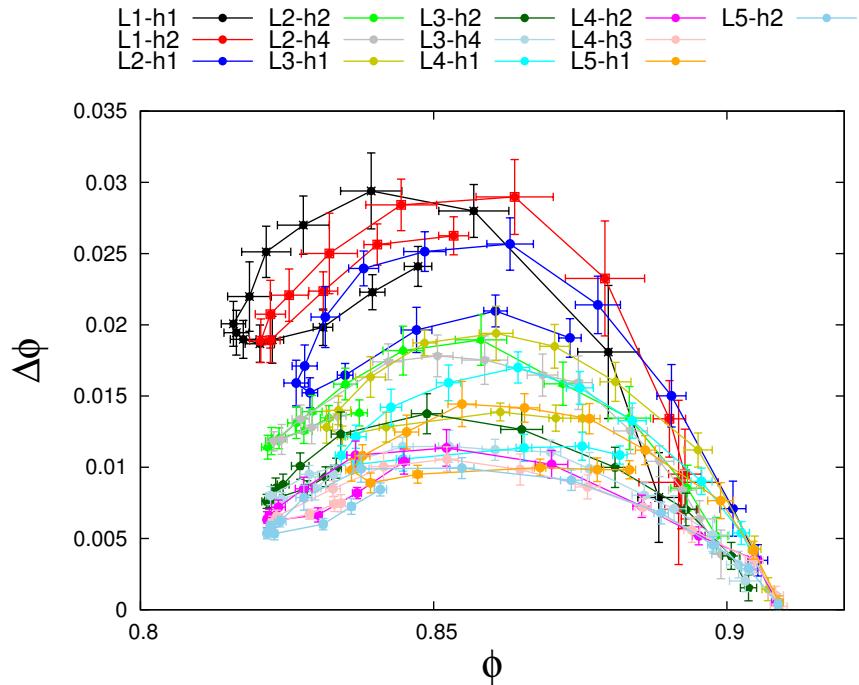


Figura 27.: Fluctuaciones de la fracción de compactación $\Delta\phi$ como función de ϕ para todos los sistemas estudiados.

máximo en un valor de $\phi \approx 0.86$ para la mayoría de los sistemas, excepto los correspondientes a las celdas con $L = L1$. Para valores grandes de ϕ , las fluctuaciones resultan casi nulas. Esto esta relacionado con el hecho de que la generación de estos estados estacionarios de alto ϕ corresponde a pulsos de Γ pequeñas. Las fluctuaciones $\Delta\phi$ correspondientes al valor de ϕ_{min} , resultan algo menores al máximo valor de las $\Delta\phi$ observado. Podemos ver también que, en algunos casos más claramente que en otros, resulta posible distinguir los valores de $\Delta\phi$ correspondientes a un mismo valor de ϕ a un lado y otro de ϕ_{min} . Todo esto está en consonancia con lo descrito en las Ref. [25, 26], mostrando que la existencia de un máximo en $\Delta\phi$ no resultaría entonces un efecto del tamaño reducido de las muestras utilizadas en esos trabajos.

El comportamiento que presentan las fluctuaciones $\Delta\phi$ en función de ϕ ha sido objeto de debate entre distintos autores. La Ref. [23] por ejemplo, encuentra una relación lineal entre estas cantidades. La Ref. [24] sin embargo, reporta un comportamiento cóncavo hacia arriba. Dichos trabajos, sin embargo, aplican un rango de intensidades de perturbación mucho menores a los que aquí estudiamos. Por otro lado, la perturbación en ambas referencias [23, 24] es aplicada mediante la inyección desde la base de la celda (tridimensional) de chorros de agua (numéricamente en el primer caso y experimentalmente en el segundo). Esto podría causar una dinámica distinta en la forma en que el sistema alcanza el equilibrio luego de ser perturbado.

Se han planteado discusiones acerca de si la existencia de un máximo en $\Delta\phi$ vs. ϕ resulta una consecuencia de la presencia de regiones de cristalización en el sistema, lo que se insinúa por el alto valor de ϕ que los sistemas alcanzan a bajas Γ . Pudimos probar que aún en sistemas donde disminuimos la cristalización, introduciendo una leve dispersión en el tamaño de las partículas, sigue observándose el comportamiento cóncavo hacia abajo de $\Delta\phi$ vs. ϕ . En relación a esto mostramos resultados en el Apéndice B.

La existencia de un máximo en la función $\Delta\phi$ vs. ϕ puede dar información no trivial sobre el espacio de configuraciones accesibles al sistema en el estado estacionario. No entraremos aquí en detalle sobre esto, ya que escapa al objetivo de la presente tesis. Diremos sin embargo que existen trabajos [33] en los que se utilizan los valores $\Delta\phi$ vs. ϕ para obtener la entropía granular (Ec. (12)) propuesta por Edwards [28].

Resulta importante estudiar de qué forma escalan las fluctuaciones $\Delta\phi$ con el número de partículas de la región analizada. Vimos en el Cap. 2 que en el límite en que las propiedades del sistema, como el volumen V o la entropía S , resultan realmente extensivas, es decir, cumplen con la condición de extensividad dada en la Ec. (10), sus fluctuaciones respecto del valor medio se incrementan con el número N de partículas en la región de análisis, según \sqrt{N} (Ec. (11)). Dado que ϕ es inversamente proporcional al volumen V , puede probarse que sus fluctuaciones resultarán entonces, una vez alcanzado el límite dado por la Ec. (10), una función de $1/\sqrt{N}$.

Lechenault et al. [32] discuten acerca del comportamiento de las fluctuaciones de ϕ en función del número N de partículas en la región analizada. Realizan medidas de $\Delta\phi$ en regiones de distinto tamaño, dentro de un mismo sistema granular estático, y encuentran que $\Delta\phi$ no escala con N de la forma que indica la Ec. (11). A partir de esto plantean la existencia de correlaciones de largo alcance en el sistema. El número de partículas que contienen las regiones utilizadas en dicho trabajo varía de ≈ 1 a ≈ 200 .

Nosotros investigamos de un modo similar al propuesto en la Ref. [32], la dependencia de $\Delta\phi$ con N , y encontramos que es posible determinar un límite en el tamaño de la región de análisis utilizada a partir del cuál $\Delta\phi$ escala con $1/\sqrt{N}$. Hemos medido $\Delta\phi$ en distintas regiones de un mismo sistema. Utilizamos para este análisis el sistema correspondiente a $L4 - h3$. Las regiones de medición fueron tomadas siguiendo el mismo método explicado en el capítulo anterior de utilización de capas que acompañan el perfil de la superficie libre de granos. En la Fig. 28 se muestran esquematizadas las regiones utilizadas. Aquí representamos regiones rectangulares sólo para facilitar la comprensión. Variamos el ancho W y espesor e de la capa y mantuvimos su centro a una profundidad constante $C = 25$. El número N de partículas promedio en la subregión analizada se calculó para cada Γ utilizada.

En la Fig. 29 (a) mostramos los valores de $\Delta\phi$ vs. ϕ para cada una de las regiones de análisis. Mantenemos, por claridad, el código de colores utilizado en la Fig. 28. Vemos que las fluctuaciones para los subsistemas con menores N resultan mayores que las de los subsistemas con mayor número de partículas. También podemos ver que para altas densidades las fluctuaciones para todos los sistemas resultan convergentes y casi nulas. En la Fig. 29 (b) podemos ver los mismos resultados graficados en la Fig. 29 (a) pero escalados utilizando \sqrt{N} (Ec. (11)). Puede observarse que este escalado permite colapsar resultados obtenidos sobre regiones de diferente tamaño si las mismas presentan $W \geq 34d$ y $e \geq 15d$. Regiones de tamaños mayores a las indicadas típicamente contendrán más de 500 partículas. Recordemos que en la Ref. [32], que utiliza como máximo $N = 200$ no se observó este acuerdo. Puede apreciarse que fluctuaciones obtenidas midiendo sobre subsistemas que poseen $N > 500$, pero que no cumplen la condición $W \geq 34d$ y $e \geq 15d$, no escalan con la forma propuesta (ver por ejemplo la diferencia entre la curva cyan y la curva roja en la Fig. 29 (b)).

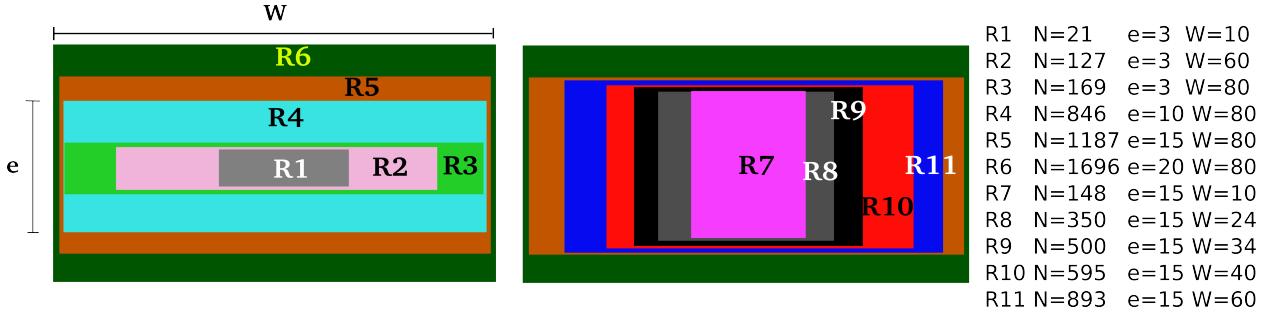


Figura 28.: Esquema de las subregiones del sistema $L4-h3$ consideradas para el análisis del comportamiento de $\Delta\phi$ como función del número de partículas media contenidas en la región de análisis. Las regiones se muestran rectangulares por simplicidad, pero utilizamos capas que acompañan el perfil libre de la superficie de granos, como lo explicamos en el capítulo anterior. Todas las regiones están centradas a una profundidad $C = 25$ y variamos el ancho W y el espesor e de la capa. A la derecha se detallan los valores de W y e correspondientes a cada región.

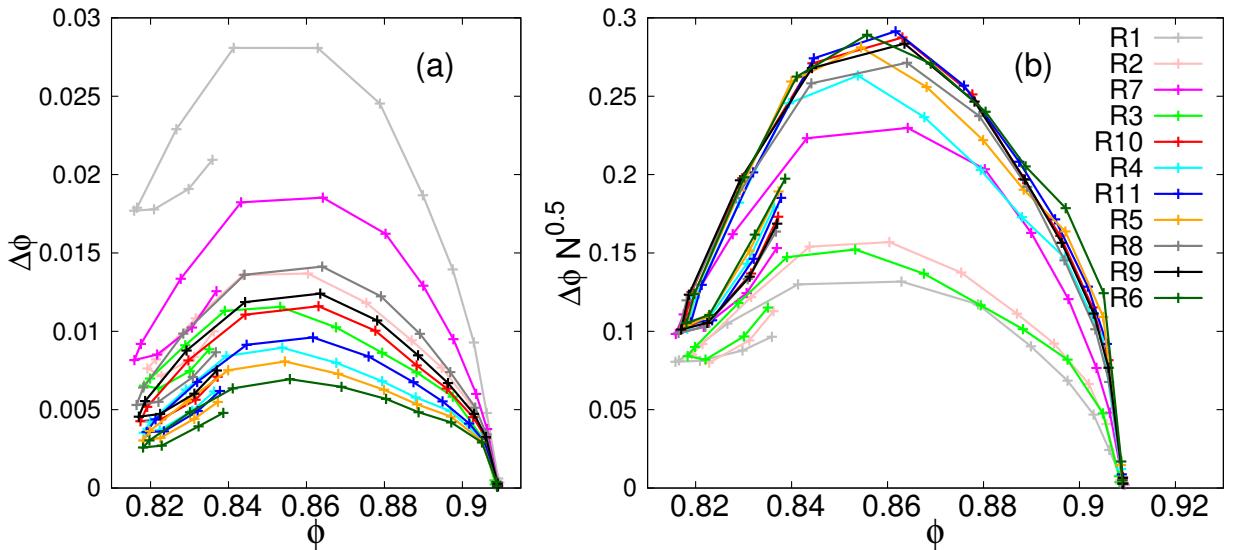


Figura 29.: (a) $\Delta\phi$ vs. ϕ y (b) $\Delta\phi \sqrt{N}$ vs. ϕ , para las regiones analizadas de la celda correspondiente a $L4-h3$. El código de colores respeta el de la Fig. 28.

Estudiamos finalmente el comportamiento de $\Delta\phi$ sobre sistemas de distinto tamaño (en vez de sobre regiones de distinto tamaño de un mismo sistema). A partir de los resultados expuestos anteriormente, y de la condición sobre el tamaño de la región para que $\Delta\phi$ escala con N de la forma dada en la Ec. (11) las capas de medición se tomaron centradas a una profundidad $C = 10$ y con un espesor $e = 15$ (excluyendo como antes partículas cuyos centros se encontrasen a distancias menores a $2d$ de las paredes laterales, lo que garantiza en los tamaños de sistemas estudiados la condición impuesta sobre W). Al tomar el mismo tipo de capas sobre sistemas con distintos anchos L , el número N de partículas consideradas era variable. En la Fig. 30 (a) podemos ver $\Delta\phi$ vs. ϕ para tres sistemas correspondientes a distintas alturas h y distinto ancho L . Puede apreciarse que las diferentes curvas en la Fig. 30 (a) no se diferencian demasiado en el valor de sus fluctuaciones, debido a que el cambio en el número de partículas es a lo sumo del doble y con el escalado propuesto esta

diferencia resulta pequeña. Sin embargo podemos observar que las fluctuaciones correspondientes a la rama de ϕ crecientes y la región cercana al ϕ_{min} si evidencian diferencias. En la Fig. 30 (b) vemos

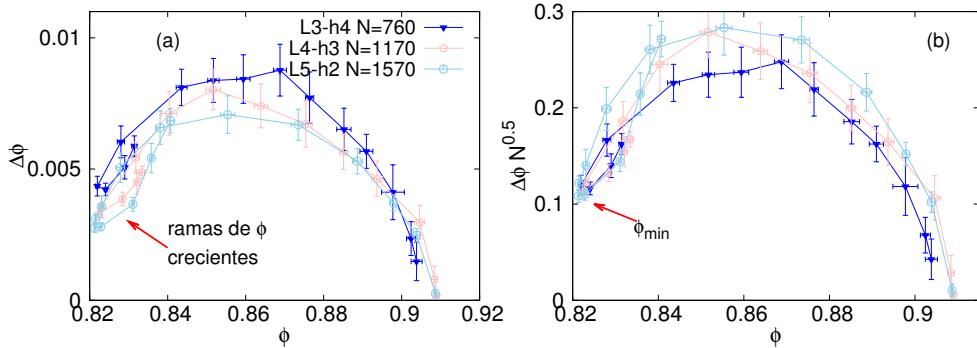


Figura 30.: (a) $\Delta\phi$ vs. ϕ y (b) $\Delta\phi N^{-1}$ vs. ϕ , para sistemas en celdas de distintos anchos L , medidos sobre una capa con $C = 10$ y $e = 15$.

$\sqrt{N}\Delta\phi$ vs. ϕ ; puede apreciarse que los resultados muestran buen acuerdo con este escalado. Para la región cercana al ϕ_{min} , donde en la Fig. 30 (a) podía apreciarse una diferencia (y para valores de ϕ correspondientes a la rama creciente de la función ϕ vs. e) el acuerdo es mejor que para la región cercana al máximo $\Delta\phi$. Discutiremos en la Secc. 5.6, después de discutir el comportamiento de Σ en sistemas de diferente tamaño y la relación de Σ con ϕ , que esta diferencia en $\Delta\phi$ puede ser atribuida a que los estados, aún teniendo el mismo valor ϕ , no resultan estados equivalentes.

5.5 TENSOR DE ESFUERZOS

En este apartado discutiremos sobre la dependencia del tensor de esfuerzos Σ con el tamaño del sistema analizado. Por simplicidad, a lo largo de esta sección y de la siguiente, nos referiremos al valor del tensor de esfuerzos por partícula ΣN^{-1} simplemente como tensor de esfuerzos o Σ . Esta magnitud resultó sensiblemente más dependiente de las dimensiones del sistema y de la región de análisis elegida, como lo discutimos en el Cap. 4.

En la Fig. 31 podemos ver el valor de $\text{Tr}\Sigma$ en función de Γ para todos los sistemas estudiados, analizados en la misma región utilizada para ϕ . $\text{Tr}\Sigma$ no resulta monótona, presentando un comportamiento decreciente para bajas intensidades y volviéndose luego suavemente creciente con Γ . El comportamiento creciente de $\text{Tr}\Sigma$ para grandes valores de Γ ya había sido reportado en trabajos previos [25, 26]. La justificación dada en dichos trabajos está relacionada con el hecho de que para altos Γ las partículas adquieren mayor energía cinética y al caer golpean a las partículas que se depositaron previamente generando, con golpes cada vez más grandes, que el estado del sistema resulte más tensionado. El comportamiento inicial decreciente a bajas intensidades no había sido reportado anteriormente.

Postulamos aquí que el cambio de comportamiento de Σ al reducir Γ sucede cuando los contactos existentes entre las partículas en una configuración mecánicamente estable, no se pierden completamente durante la perturbación pulsada. Esto se ve apoyado por la Fig. 32. Llamamos C_0 al número de contactos promedio por partícula en una configuración y C_f al número de estos contactos que se conservan durante la perturbación (esto es que el contacto entre dos partículas nunca deja de existir desde el inicio del pulso hasta que el sistema adquiere una nueva configuración mecánica estable). La fracción de contactos persistentes será C_f/C_0 . En la Fig. 32 (b) se gráfica el porcentaje

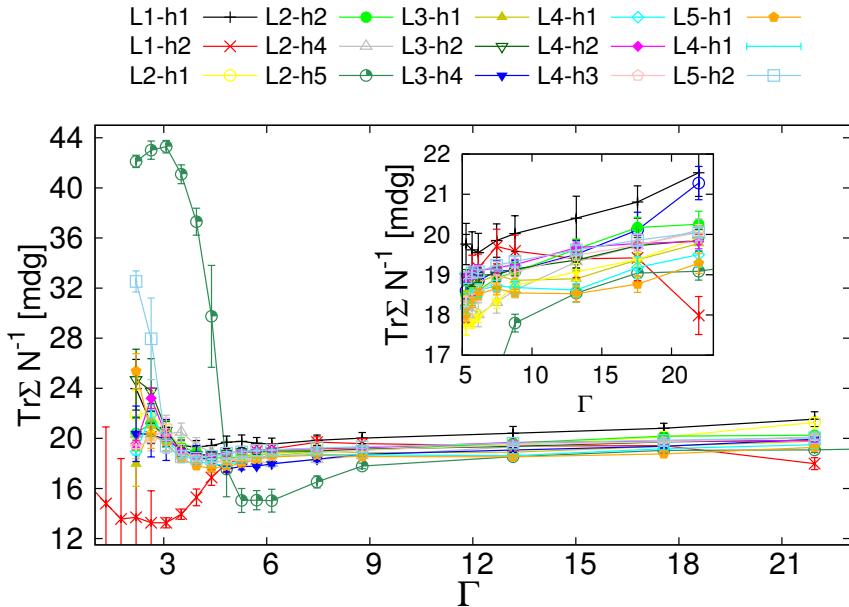


Figura 31.: $\text{Tr}\Sigma$ en función de Γ para todos los sistemas estudiados. En el recuadro interno puede verse ampliada la región donde el comportamiento de esta función resulta creciente.

de contactos persistentes C_f/C_0 como función de Γ para dos sistemas, correspondientes a $L3 - h2$ y $L2 - h4$. Para calcular este porcentaje se siguió cada contacto, para las partículas en la capa de análisis, durante la simulación de 10 pulsos consecutivos y se promedió. Las barras de error se obtuvieron de la desviación estándar de estos resultados. En la Fig. 32 (a) se muestra un detalle de las curvas de $\text{Tr}\Sigma$ vs. Γ correspondientes a esos mismos sistemas. Puede verse que el punto donde el comportamiento de $\text{Tr}\Sigma$ cambia de decreciente a creciente se corresponde con el momento en que C_f/C_0 se vuelve igual a cero.

Tengamos en cuenta que la fuerza de fricción estática depende de la historia del contacto. Esto es, una vez generado el contacto entre dos partículas (o entre una partícula y las paredes de la celda) la fuerza tangencial de fricción estática aumenta de forma proporcional al desplazamiento relativo que se produce entre las superficies pudiendo tomar valores entre 0 y μF_n . Por ejemplo, si dos granos se ponen en contacto de forma suave (generando un desplazamiento mínimo entre ambos) la fuerza de contacto tangencial entre ellos resultará baja (que es lo que sucede en el mínimo de $\text{Tr}\Sigma_{\min}$). Las perturbaciones de baja intensidad permiten que algunos contactos persistan. Estos contactos incrementan sutilmente el desplazamiento relativo tangencial pulso tras pulso, dando origen a los altos valores de Σ . En este efecto también debe considerarse que un leve desplazamiento de dos partículas en contacto no modificará sustancialmente el valor ϕ del sistema, pero sí el valor de su fuerza normal.

De este resultado es posible desprender dos conclusiones importantes relacionadas tanto con la ergodicidad de los estados recorridos como con la forma en que el sistema alcanza el estado estacionario. Hemos discutido (Cap. 4) que la forma en que el sistema recorre, una vez alcanzado el estado estacionario, los estados compatibles con la perturbación aplicada, puede considerarse ergódica para un régimen de altas amplitudes, pero deja de serlo en el régimen de bajas amplitudes [6]. A la luz de los resultados expuestos puede argumentarse que el límite entre estos dos comportamientos se encuentra asociado a una transición existente en el sistema; relacionada con la aparición de contactos persistentes durante toda la perturbación. A bajos valores de Γ , C_f/C_0 resulta diferente de

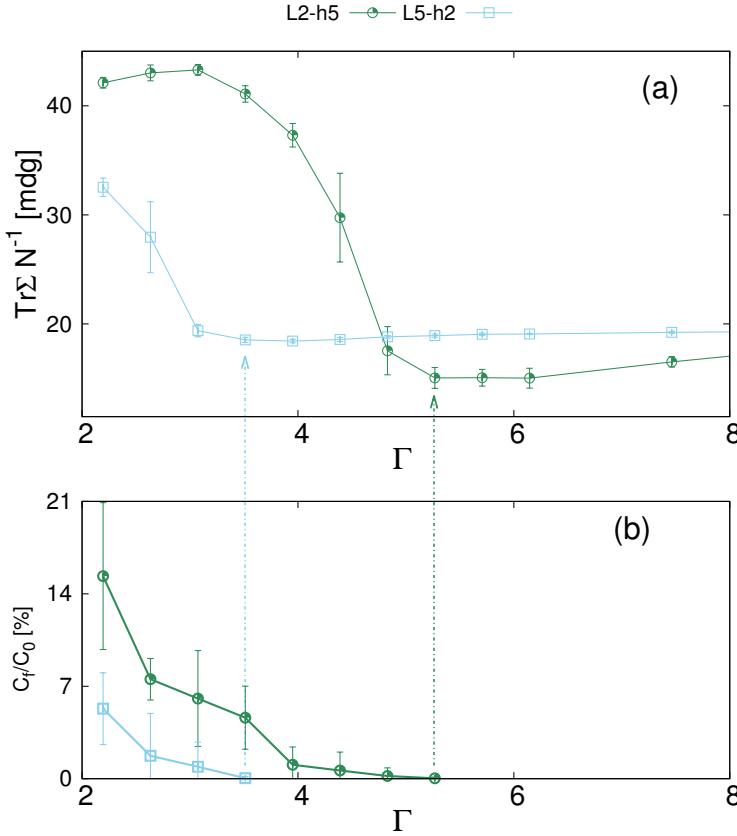


Figura 32.: (a) Detalle de $\text{Tr}\Sigma$ en función de Γ para los sistemas $L3 - h2$ y $L2 - h4$. (b) Porcentaje de contactos persistentes C_f/C_0 como función de Γ . Aquí C_0 es la cantidad de contactos promedio por partícula en la configuración de equilibrio anterior a la aplicación de la perturbación y C_f es el número de estos contactos que se conservaron durante la perturbación. Estas curvas se corresponden con los sistemas mostrados en (a). Por claridad sólo se grafican los puntos donde C_f/C_0 resulta distinto de cero.

cero y esto genera efectos de memoria en el sistema (en particular en la forma en que el sistema acumula estrés). Para altos Γ , todos los contactos son destruidos por la aplicación del pulso y nuevos contactos se generan cuando el sistema vuelve a adquirir una configuración mecánicamente estable. La forma en que las partículas alcanzan esa nueva configuración de equilibrio depende sólo de la perturbación aplicada. No hay efectos de memoria que intervengan en la nueva configuración de equilibrio.

Vemos que los valores de Γ a los que sucede esta transición en la persistencia de contactos dependen del tamaño del sistema estudiado. Sin embargo, esta transición no está relacionada con la existencia ni del mínimo de ϕ vs. Γ , ni del máximo en $\Delta\phi$ vs. ϕ . Estos últimos comportamientos ocurren a valores de Γ mayores al que corresponde a la pérdida de memoria en los contactos del sistema. El régimen de altas amplitudes, generalmente poco estudiado debido a las dificultades técnicas experimentales y numéricas que implica, garantizaría entonces la ergodicidad requerida por la mecánica de equilibrio.

Por otro lado, la pérdida de memoria que experimenta el sistema al ser perturbado con intensidades altas, también explicaría el cambio de comportamiento con que el sistema evoluciona al estado estacionario. Hemos dicho (Cap. 2) que para muy bajas amplitudes esta evolución sigue un comportamiento logarítmico en el número de perturbaciones. El protocolo desarrollado por el Grupo de Chicago [19] resultó crucial para disminuir los tiempos necesarios para alcanzar el estado estacio-

nario asociado a esas perturbaciones. Sin embargo, para amplitudes de perturbación grandes, estos tiempos se acortan a unos pocos golpes [25], pudiéndose considerar que el estado estacionario se alcanza de forma casi inmediata. Este último comportamiento resulta comprensible, a la luz del análisis desarrollado sobre la pérdida de memoria en los contactos del sistema, ya que la configuración luego de cada golpe resultaría descorrelacionada de la configuración previa del sistema.

Como dijimos en el Cap. 3, implementamos también un tipo de perturbación no realista sobre el sistema, que nos permitía generar una expansión homogénea. Este tipo de perturbación es obtenido multiplicando la coordenadas z de cada una de las partículas por un valor constante $r > 1$ y luego, antes de dejar evolucionar al sistema bajo la acción de g , dando a las partículas valores (pequeños) de velocidad, con módulo constante y dirección aleatoria. A partir de los resultados correspondientes a la expansión homogénea pudimos verificar que, si las partículas son forzadas a perder y crear nuevamente todos sus contactos a cada perturbación¹, es decir, si no existen efectos de memoria en el sistema, el tensor de esfuerzos del sistema resulta una función creciente de la intensidad de la perturbación. En la Fig. 33 vemos este comportamiento. Aquí graficamos $\text{Tr}\Sigma$ en función del parámetro de expansión r , que para el tipo de expansión (homogénea) implementada coincide con ϵ .

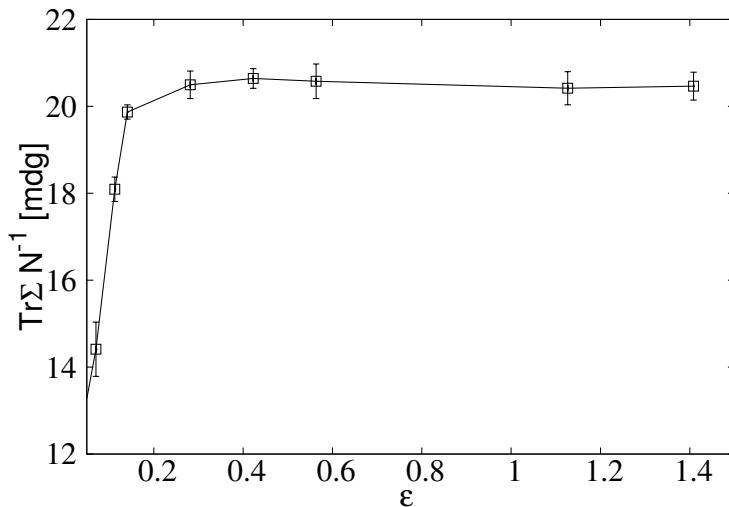


Figura 33.: $\text{Tr}\Sigma$ en función de ϵ obtenido aplicando al sistema una expansión homogénea. Aquí $\epsilon = r$ está relacionado con la expansión entre partículas generada por la perturbación y r es el valor de la constante por la que se multiplicaron las coordenadas z de las partículas para simular la perturbación. Los resultados corresponden a un sistema $L2\text{-}h5$.

En los análisis siguientes excluiremos los resultados correspondientes a estados donde el sistema presenta memoria, es decir, valores de Γ donde $C_f/C_0 > 0$. Esto lo haremos bajo la suposición de que este efecto es el causante de la ruptura de la ergodicidad en el tensor de esfuerzos discutida en el Cap. 4.3, donde hemos mostrado que es posible tener estados de ϕ bien definido donde no sea posible definir el valor de Σ . Como estamos interesados en estados estacionarios reproducibles del sistema granular, es necesario garantizar que ambas magnitudes se encuentren bien definidas.

¹ En este modelo de partículas blandas, el solapamiento típico de los granos en el equilibrio mecánico es de aproximadamente $0,01d$, por lo que si la expansión homogénea se lleva a cabo aplicando amplitudes de expansión mayores a $r > 0,05$, se fuerza efectivamente al sistema a reconstruir sus contactos golpe tras golpe.

En la Fig. 34, graficamos $\text{Tr}\Sigma$ en función del escalado ϵ propuesto en la Ec. (26). Graficamos por claridad sólo sistemas correspondientes a los pares de alturas $h2$ y $h4$. No graficamos, por lo anteriormente dicho, los datos para los cuáles $C_f/C_0 > 0$. En el recuadro interno se muestran estos mismos resultados graficados en función de la amplitud Γ de la perturbación. Podemos ver que $\text{Tr}\Sigma$ en sistemas correspondientes a un mismo h , resultan equivalentes, independientemente de L . Hemos visto, sin embargo, que para L angosto (menor o igual a $L2$) estos resultados no son convergentes en algunos sistemas aunque estos presenten el mismo h . Podemos ver esto por ejemplo, en la curva verde clara de la Fig. 34, correspondiente a un sistema de $L = L2$. Estos comportamientos (la convergencia de $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas de un mismo h , y la existencia de efectos de tamaño finito para sistemas con $L \leq L2$) se verán de forma más clara en la sección siguiente.

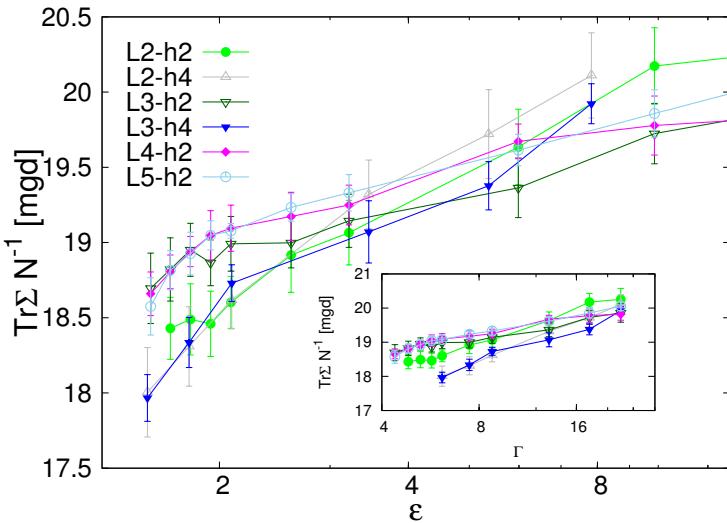


Figura 34.: $\text{Tr}\Sigma$ vs. ϵ para sistemas correspondientes a $h2$ y $h4$.

Aún cuando el comportamiento de todas las curvas graficadas en la Fig. 34 resulta creciente, puede verse que el valor mínimo alcanzado por cada una de ellas (correspondiente al punto de transición discutido antes) depende de la altura h del sistema. Esto podría atribuirse a que el comportamiento del tensor de esfuerzos está relacionado al tipo de deposición que se produce y a la forma en que el sistema disipa la energía entregada por el pulso. La forma en que se produce esta disipación dependerá, no sólo de la expansión efectiva que sufren las partículas entre sí, sino también de la cantidad de material sobre el que se depositan al caer. Puede considerarse entonces que el material que se encuentra por debajo de la región analizada actúa como un amortiguador. Esto es coherente con que, medidos sobre la misma capa respecto a la superficie, sistemas con mayor h presenten un valor menor para el mínimo de $\text{Tr}\Sigma$. Las partículas disipan en un “colchón” más alto de partículas, sobre el que caen, mayor cantidad de energía, en vez de almacenarla entre sus contactos.

Queremos remarcar aquí la importancia que ha tenido en este trabajo, en particular en los resultados que acabamos de describir, el uso de las capas de medición propuestas en el Cap. 4. En la Fig. 35 se grafica la misma función $\text{Tr}\Sigma$ vs. Γ , para sistemas correspondientes a $h = h2$ y distintos valores L . En la Fig. 35 (a) se utilizó el método de medición por capas que hemos utilizado a lo largo de este trabajo, con una capa de $7d$ de espesor centrada a $13d$ de la superficie libre del sistema. En la Fig. 35 (b) se muestran resultados obtenidos midiendo en capas horizontales, centradas a $13d$ por debajo de la partícula con mayor coordenada del sistema y con un espesor de $7d$. Es evidente que

los resultados en la Fig. 35 (b) no resultan comparables entre sí, y que no es posible de este tipo de análisis obtener la conclusión de que (para sistemas con $L \geq L_3$) el valor de $\text{Tr}\Sigma$ resulta una función de h independiente del valor de L .

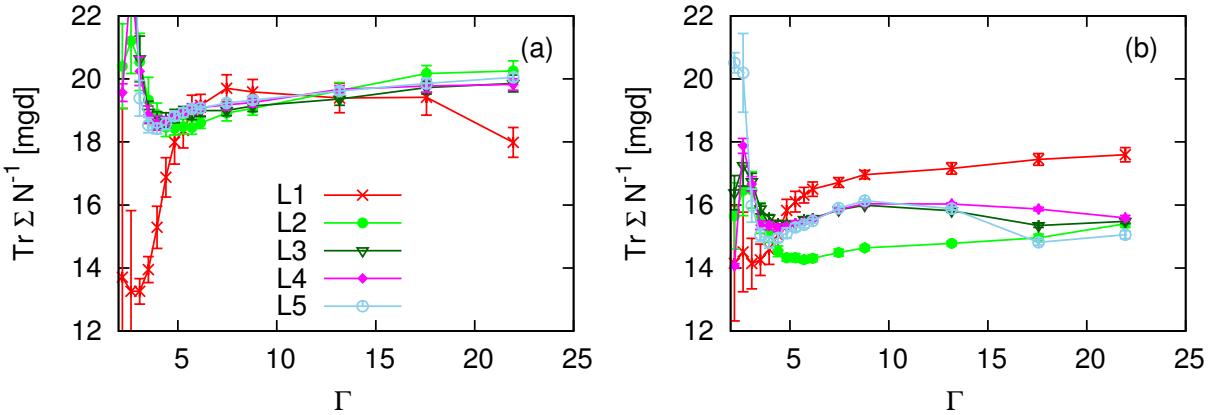


Figura 35.: $\text{Tr}\Sigma$ vs. Γ para sistemas correspondientes a una altura $h2$ y distintos anchos L , medidos sobre (a) capas que acompañan el perfil de la superficie libre del sistema con $C = 13$ y $e = 7$, (b) capas horizontales, centradas a $13d$ desde la altura de la partícula con mayor coordenada z y con un espesor $e = 7$.

Por último hablaremos sobre las fluctuaciones $\Delta\Sigma$ de Σ . Recordemos que nos referimos aquí como Σ al valor de ΣN^{-1} , como lo hemos dicho al inicio de la sección. En la Fig. 36 (a) vemos $\Delta\text{Tr}\Sigma$ vs. $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas de diferente ancho L y diferente h . Podemos apreciar que aquí las curvas se encuentran desplazadas entre sí. En la Fig. 36 (a) se muestran resultados correspondientes a sistemas con diferente L (y distinto h), por lo que la capa de medición contiene en cada caso diferente cantidad de partículas. Por consistencia con lo discutido en la sección anterior, estos resultados se midieron sobre una capa con $C = 10d$ y $e = 15d$, alejada por $2d$ de cada una de las paredes laterales, es decir que para los sistemas estudiados cumple la condición $W \geq 34d$. En la Fig. 36 (b) mostramos los mismos resultados que en la Fig. 36 (a), pero escalados con \sqrt{N} . Se ve que las distintas curvas muestran acuerdo en algunas regiones, correspondientes a valores altos de $\text{Tr}\Sigma$, pero que el acuerdo no resulta bueno en general. Veremos en la sección siguiente, que al igual que hemos dicho para el comportamiento de las fluctuaciones de densidad, la diferencia en los valores de las fluctuaciones de $\text{Tr}\Sigma$ puede atribuirse a que el estado del sistema, aún cuando el tensor de esfuerzos presente el mismo valor, puede diferenciarse por su valor de ϕ .

5.6 ESPACIO DE FASES “TERMODINÁMICO”

En esta última sección estudiaremos el comportamiento de las variables del sistema discutidas anteriormente, en el espacio de fases $\text{Tr}\Sigma-\phi$.

En la Fig. 37 (a) se muestran curvas ϕ vs. $\text{Tr}\Sigma$ correspondientes a sistemas con $h = h2$ y distintos valores de L . Estas curvas corresponden al camino de estados estacionarios recorridos por el sistema durante el protocolo de recocido. Puede verse que estas curvas resultan convergentes, a excepción de la obtenida con $L = L2$. El mismo comportamiento cualitativo fue observado con celdas de altura $h = h1$. Para celdas con $h = h4$ los resultados resultaron convergentes aún para $L = L2$,

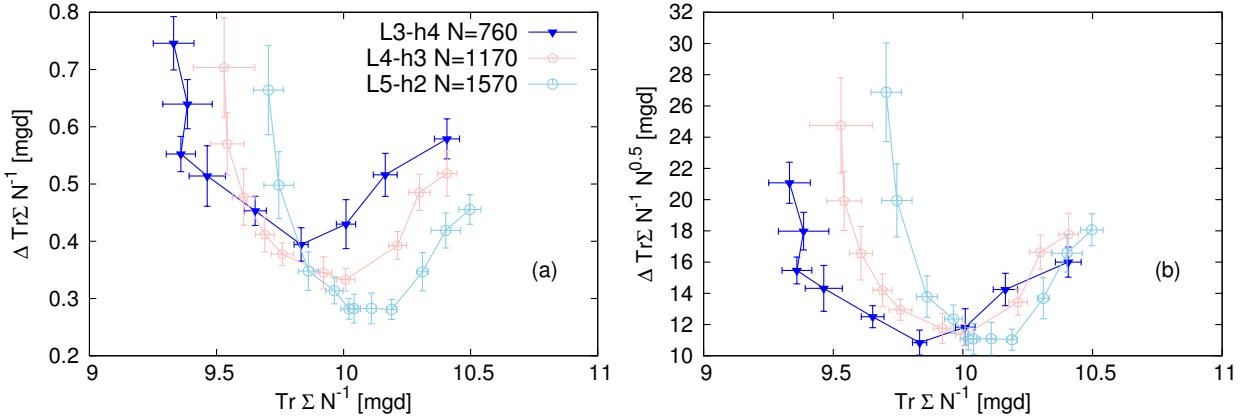


Figura 36.: $\Delta \text{Tr}\Sigma$ (a) y $\sqrt{N} \Delta \text{Tr}\Sigma$ (b) como función de $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas de distintos tamaños, medidos sobre una capa con $C = 10$ y $e = 15$.

pero no así para $L = L1$. Vemos entonces que la presencia de paredes induce efectos de tamaño finito en el cálculo de $\text{Tr}\Sigma$, pero que es posible encontrar un tamaño L a partir del cual estos efectos pueden considerarse despreciables. Para los tamaños de sistemas utilizados en la presente tesis podemos decir que, para anchos mayores o iguales a $L3$, el valor de $\text{Tr}\Sigma$ resulta convergente, si el sistema posee la misma altura h . En la Fig. 37 (b) se muestran curvas ϕ vs. $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas que presentan distintos L y valores de h correspondientes a $h2$ y $h4$. Vemos que curvas correspondientes a sistemas con distinto L pero igual h resultan convergentes mientras que sistemas de diferente h recorren estados diferentes. Para conseguir estos resultados fue importante la implementación del

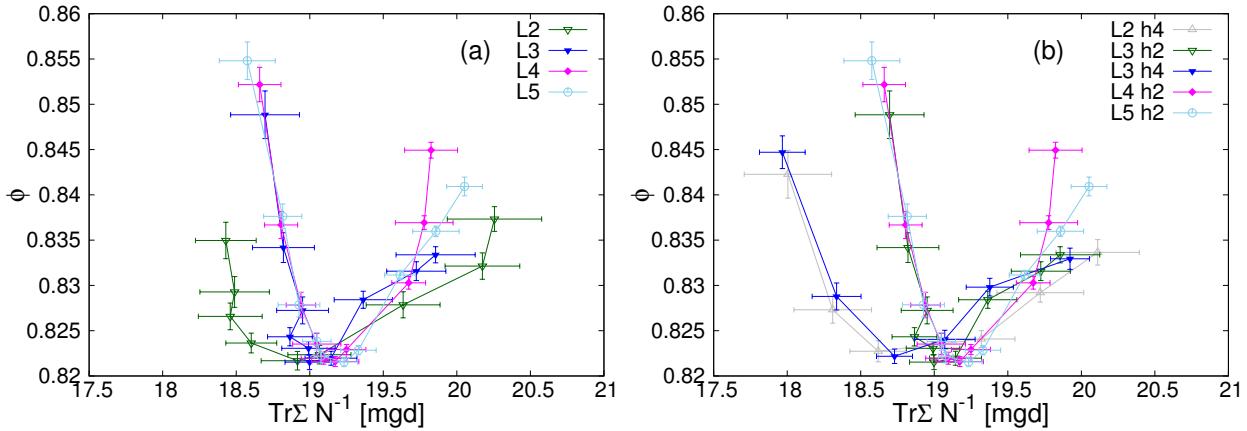


Figura 37.: (a) ϕ como función de $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas correspondientes a la misma altura $h2$ y distintos anchos L . (b) lo mismo que en (a) pero medidos sobre sistemas correspondientes a los pares de alturas $h2$ y $h4$ y distintos valores L .

método de medición por capas explicado en el capítulo anterior, ya que de otra manera no resulta posible la comparación entre sistemas de diferentes L aún para un dado h . Nótese que en las Figs. 37 (a) y (b) sólo se incluyen estados que se encuentran bien definidos tanto en ϕ como en Σ , es decir

estados donde el sistema no posee efectos de memoria.

Como comentamos en la sección anterior, sistemas de diferente altura inducen una perturbación diferente sobre una capa ubicada a una dada profundidad, originando estados distinguibles esencialmente por su estado de tensión Σ . Como consecuencia, para poder comparar estados de diferentes sistemas, es necesario que las columnas de granos sean de similar altura. La altura de la columna puede ser usada como un parámetro adicional que controla la excitación externa sobre la capa de interés, que se suma a la amplitud A y la frecuencia ω del pulso.

Finalizando este capítulo mostraremos a continuación evidencias de que dados los valores ϕ y Σ de estados estáticos estacionarios para un sistema granular, este estado macroscópico del sistema resulta únicamente determinado.

En la Fig. 38 (a) mostramos ϕ vs. $\text{Tr}\Sigma$ para sistemas que presentan tres diferentes valores de h (y que corresponden a anchos $L > L_2$). Como dijimos anteriormente, los estados de equilibrio estacionarios obtenidos en estos sistemas (correspondientes a diferente h) recorren distintas regiones del espacio de fases. En la Fig. 38 (b) se muestra ϕ vs. las fluctuaciones escaladas $\sqrt{N}\Delta\phi$, correspondientes a los mismos sistemas mostrados en la Fig. 38 (a). Esta figura es equivalente a la Fig. 30, sólo que por comodidad rotamos los ejes. En la Fig. 38 (c) se muestran las correspondientes $\sqrt{N}\Delta\text{Tr}\Sigma$ vs. Σ (figura equivalente a la Fig. 36). Remarcamos que las regiones de análisis utilizadas contienen distinto número de partículas (por corresponder a sistemas de diferente L), por esto, tanto las fluctuaciones de ϕ como las de $\text{Tr}\Sigma$ se escalaron a con \sqrt{N} . Mostramos en las secciones anteriores que escalando las fluctuaciones (de ϕ y Σ) con \sqrt{N} era posible hacer coincidir las fluctuaciones correspondientes a sistemas de diferente tamaño en algunas regiones, pero que sin embargo estas no resultaban convergentes sobre todos los valores accesibles a los distintos tamaños de sistema. Esto podemos verlo en la Fig. 38 (b), donde las fluctuaciones correspondientes a ϕ cercanos a 0,86 (máximo de la función $\Delta\phi$ vs. ϕ discutido en la Sec. 5.4) se encuentran notoriamente más dispersas que las correspondientes a densidades cercanas a 0,82 (mínimo de ϕ). En la Fig. 38 (c) podemos ver un comportamiento similar al que ocurre con las fluctuaciones de densidad para las correspondientes fluctuaciones de $\text{Tr}\Sigma$. Aquí las fluctuaciones correspondientes a sistemas con distinto número de partículas resultan convergentes al ser escaladas con \sqrt{N} para valores altos de $\text{Tr}\Sigma$, pero no resultan convergentes para los valores más bajos. Esto podemos ahora justificarlo a partir de ver (en la Fig. 38 (a)) que estas fluctuaciones corresponden a estados del sistema que no son equivalentes. Es decir, estados del sistema con un mismo valor ϕ que pueden ser distinguibles por su correspondiente valor de Σ , presentan fluctuaciones diferentes. Lo mismo sucede para las fluctuaciones de Σ . Sin embargo, estados que poseen el mismo valor de ϕ y $\text{Tr}\Sigma$, obtenidos a partir de sistemas de diferente tamaño, presentan los mismos valores de fluctuaciones (con el escalado propuesto). Este comportamiento apoya la propuesta de que el estado del sistema granular queda determinado a partir del conjunto de parámetros V (relacionado con ϕ), Σ y N .

Esto constituye un resultado importante porque la discusión acerca de cuál es el conjunto mínimo de variables necesarias para definir el estado macroscópico de los sistemas granulares se encuentra abierta y es fundamental para poder avanzar en la formulación de un marco teórico, como el propuesto por Edwards [28].

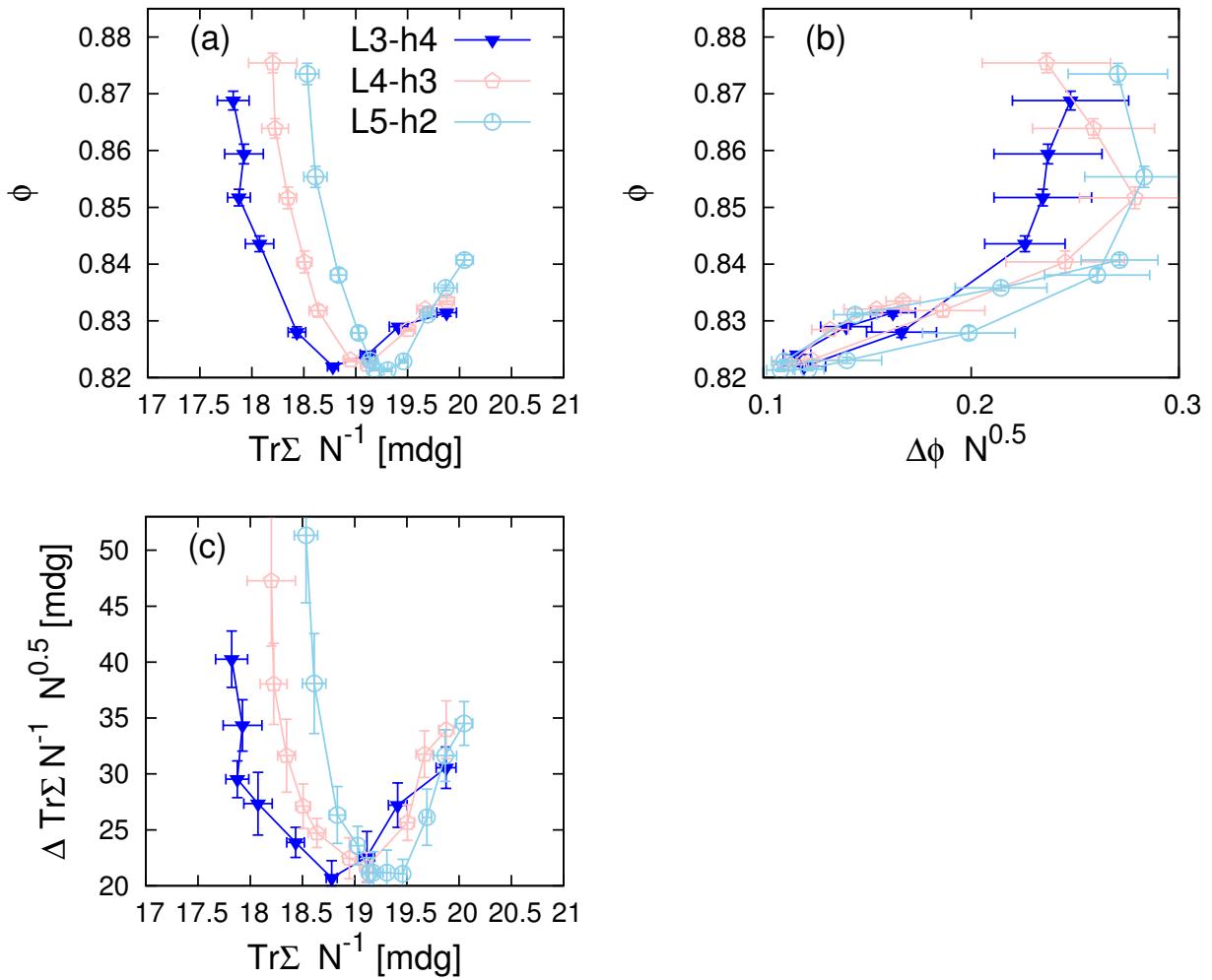


Figura 38.: (a) Espacio de fases $\text{Tr}\Sigma$ vs. ϕ . (b) ϕ vs. $\Delta\phi \sqrt{N}$. (c) $\text{Tr}\Sigma$ vs. $\Delta\text{Tr}\Sigma \sqrt{N}$. Estos resultados fueron medidos sobre una región centrada a $10d$ desde la superficie, y de $15d$ de espesor, ya que mostramos en las secciones anteriores que este tamaño de región permite realizar el escalado correspondiente para las fluctuaciones.

6

CONCLUSIONES

6.1 SUMARIO

En esta tesis estudiamos el comportamiento de las cantidades macroscópicas ϕ (fracción de volumen ocupado) y Σ (tensor de esfuerzos) de materiales granulares en empaquetamientos estáticos en estados estacionarios generados mediante excitaciones pulsadas. Estudiamos la dependencia de ϕ y Σ con el tamaño del sistema. Esto resulta importante debido a que los trabajos existentes, tanto experimentales como numéricos, utilizan por lo general sistemas de diferentes tamaños y las comparaciones cuantitativas resultan elusivas.

Una de las contribuciones principales de este trabajo es la de haber implementado un método que permite, seleccionando regiones de medición específicas en los distintos sistemas, realizar comparaciones cuantitativas de los resultados obtenidos. Este método fue explicado en la sección 4.2, y consiste en realizar las medidas de las propiedades macroscópicas sobre partículas ubicadas en una capa angosta tomada a una distancia específica por debajo de la superficie libre de la columna de granos. Esta capa no debe tomarse horizontal, sino que debe seguir la forma de la superficie libre de la columna de granos. La superficie del material presenta una inclinación que resulta más marcada al ensanchar la celda contenedora.

A partir de la implementación del método de medición por capas fuimos capaces de realizar comparaciones entre los resultados obtenidos en cada uno de los sistemas simulados. Esto nos permitió validar un nuevo parámetro ϵ para la caracterización de la perturbación externa. Este parámetro está relacionado con la separación geométrica máxima de las partículas durante la perturbación y fue propuesto en trabajos previos [14]. Utilizando como primera aproximación que la perturbación induce que el sistema se expanda de forma homogénea, propusimos una forma funcional para la variable ϵ (Ec. (26)), que tiene en consideración tanto las características del pulso aplicado como la altura h del sistema perturbado. Con esta forma funcional de ϵ fuimos capaces de hacer coincidir las distintas curvas ϕ vs. Γ obtenidas en los distintos sistemas, en una única curva, con bastante buen acuerdo. Graficando ϕ vs. ϵ las posiciones del mínimo que muestra ϕ como función de la intensidad de la perturbación aplicada colapsan. Más aún, fuimos capaces de comparar cuantitativamente y hacer coincidir en el plano ϕ - ϵ resultados numéricos propios con resultados experimentales reportados por otros grupos [35]. Este último hecho sienta un antecedente importante, porque permite en adelante hacer predicciones sobre los valores de ϕ en el estado estacionario.

Pudimos verificar la existencia de un mínimo en la función ϕ vs. ϵ en todos los tamaños de sistemas analizados, por lo que este fenómeno no debería ser atribuido a un efecto de tamaño finito.

En relación a las fluctuaciones de densidad $\Delta\phi$, definimos un tamaño mínimo para la región de análisis que garantiza que $\Delta\phi$ pueda ser escalable con $\sqrt{N_c}$, donde N_c es el número de partículas contenidas en dicha región. Es decir que $\Delta\phi$ sigue la dependencia funcional con N_c que establece la mecánica estadística para las fluctuaciones de cantidades macroscópicas en sistemas que no presentan correlaciones de largo alcance. El espesor e de la región debe ser mayor a 15 diámetros de grano, y el ancho $W \geq 34$. Para tamaños menores las correlaciones presentes hacen que $\Delta\phi$ dependa del tamaño de la región de análisis.

En relación con el comportamiento de la función $\Delta\phi$ vs. ϕ , mostramos que esta resulta cóncava hacia abajo, en acuerdo con trabajos previos [25, 26].

El método de medición por capas nos permitió comparar sobre los distintos sistemas el valor medido del tensor de esfuerzos Σ . La realización de medidas de Σ sobre regiones seleccionadas con criterios diferentes al aquí utilizado, ya sea tomando capas horizontales o midiendo sobre el sistema entero de partículas, da resultados que no pueden compararse ni cualitativa ni cuantitativamente sobre sistemas de diferentes tamaños. Por un lado, Σ no resulta homogéneo, sino que depende, por la presencia del campo gravitatorio, de la profundidad, es decir, de la cantidad de material que hay por encima de la región de análisis. Por otro lado, el hecho de que la superficie libre de la columna de granos no resulte horizontal, hace que la profundidad a la que se encuentran las partículas varíe, aún cuando dos partículas posean la misma coordenada z .

En relación al tensor de esfuerzos Σ obtuvimos tres resultados importantes, que establecen un marco a partir del cuál resultaría posible la comparación de resultados en sistemas de diferentes tamaños:

(1) Comprobamos que Σ medido sobre distintos sistemas utilizando una capa ubicada a la misma profundidad respecto de la superficie, y de un mismo espesor, no resulta equivalente entre sistemas que presentaban distinta altura h . Esto indica que Σ depende, no sólo de la cantidad de material que se encuentra sobre la capa analizada, sino también de la cantidad de material que se encuentra por debajo.

(2) Vimos que para valores de ancho de celda $L \geq 56$ diámetros de granos las medidas dejan de verse afectadas por la presencia de las paredes laterales del recipiente y el comportamiento de Σ se vuelve independiente del valor de L . Como consecuencia de esto, proponemos que para realizar comparaciones cuantitativas entre medidas de Σ en diferentes sistemas, es necesario, además de aplicar el método de medición por capas, que los sistemas posean un mismo valor de h y un ancho de celda mayor a $56d$.

(3) Por último, reportamos la existencia de efectos de memoria en los sistemas para intensidades bajas de golpes donde las partículas mantienen parte de sus contactos durante la perturbación. Estos efectos de memoria son los responsables del comportamiento decreciente que muestra $\text{Tr}\Sigma$ para bajas intensidades de pulso ya que los contactos entre partículas envejecen golpe tras golpe. El mínimo de $\text{Tr}\Sigma$ como función de la intensidad de la perturbación sucede cuando todas las partículas pierden sus contactos durante el golpe y crean nuevos contactos al volver a quedar en reposo, es decir, cuando desaparecen los efectos de memoria en el sistema. Esta transición resulta de importancia porque puede asociarse a la ruptura de ergodicidad que sufre el sistema a bajas intensidades de golpes (discutida en la Ref. [6] y que nosotros mostramos en la Sec. 4.3). Vimos sin embargo que es posible que el sistema presente valores bien definidos de ϕ pero no de Σ . Este comportamiento hace que no resulte correcto utilizar, con el objetivo de determinar si el estado estacionario del sistema resulta ergódico, sólo medidas sobre el valor de ϕ . Es necesario garantizar que Σ también lo sea. También vimos que la ruptura de ergodicidad que ocurre en Σ resulta más evidente que en ϕ . Esto, sumado a la transición existente en relación a la pérdida de memoria en el sistema, que puede ser identificada a partir del cambio de comportamiento de Σ , nos permite definir un criterio para

garantizar que el estado estacionario del sistema se encuentra efectivamente determinado, y que el sistema recorre las distintas configuraciones compatibles de forma ergódica.

Definimos entonces un método que nos permite asegurar que estamos generando sistemas que cumplen las hipótesis propuestas por la teoría de la mecánica estadística granular de Edwards [28]. Esto, sumado al hecho de que demostramos que es posible que el sistema recorra distintos puntos en el espacio de fases $\Sigma\text{-}\phi$ de forma no unívoca, es decir, que es posible encontrar estados que presenten un mismo valor de ϕ a distintos valores de Σ y viceversa, nos plantea un rico escenario donde poner a prueba la validez de los enunciados propuesto por la estadística granular.

En resumen, creemos que este trabajo aporta al conocimiento de los sistemas granulares, en particular de los empaquetamientos estáticos en estados estacionarios generados por la aplicación repetida de golpes de la misma forma y amplitud en los siguientes aspectos:

- Establece criterios de medición que permiten predecir valores de las variables macroscópicas sobre un sistema de un tamaño, a partir de conocer el comportamiento de estas variables en otro tamaño de sistema. Brevemente, las celdas deben tener un ancho mínimo, las columnas de material deben tener la misma altura y las medidas deben realizarse sobre capas angostas que acompañen el perfil de la superficie libre.
- Propone un criterio para determinar bajo qué condiciones es posible asegurar que el estado del sistema es ergódico: en cada pulso las partículas deben perder todos sus contactos, para que dejen de existir efectos de memoria y envejecimiento.
- Encuentra un tamaño mínimo para las regiones de análisis a partir del cual resulta posible escalar las fluctuaciones, tanto de ϕ como de Σ con la inversa de la raíz cuadrada del número de partículas contenidas en la región.

6.2 PERSPECTIVAS

Como vimos el comportamiento cualitativo de Σ depende de la profundidad respecto a la superficie en que es ubicada la capa de medición. También discutimos que este comportamiento depende no sólo de la cantidad de material que se ubica por encima de la capa de medición, sino también del material que se encuentra debajo. Un estudio detallado de estos efectos permitiría en el futuro proponer una nueva variable con la cuál sea posible predecir el comportamiento cualitativo de Σ , del modo que lo hace ϵ en relación a ϕ . Esto permitiría predecir el valor de las variables macroscópicas alcanzadas por el sistema en el estado estacionario, conociendo el tamaño del sistema y las características del pulso.

Queda pendiente para un trabajo futuro, proponer mejores aproximaciones para el cálculo de ϵ , que permitan mejorar el colapso de resultados obtenidos en sistemas de diferentes tamaños, en particular, en la región de grandes amplitudes, donde la función de ϕ vs. ϵ resulta creciente.

El estado del sistema recorre diferentes curvas sobre el espacio de fases “termodinámico” $\phi\text{-}\Sigma$, y como mostramos estas dos variables no se encuentran unívocamente relacionadas. Para recorrer distintas regiones de este espacio de fases “termodinámico” propuesto, puede variarse entonces ya sea la altura de columna de granos o las características de la perturbación. Resulta interesante estudiar el comportamiento del sistema recorriendo ciclos cerrados del espacio de fases y determinar las regiones de este espacio accesibles a los sistemas granulados en configuraciones estáticas en estados estacionarios. Un estudio de estas caracterísitas sería valioso en relación a avanzar en el conocimiento estadístico de estos sistemas físicos.

Resultaría de interés también, realizar un estudio sobre la dependencia de las variables macroscópicas (ϕ y Σ) con el modelo de fuerzas implementado. En particular hemos obtenido resultados preliminares al modificar el modelo de fuerzas utilizado en la presente tesis (que presenta una interacción normal restitutiva proporcional a la distancia de solapamiento de los radios de las partículas) por un modelo en que dicha interacción es proporcional al área de solapamiento. Estos resultados muestran que esta modificación afecta no sólo al comportamiento del tensor de esfuerzos, lo que resulta esperable, sino que afecta también la forma en que se comporta ϕ . Dado que existen pocos resultados experimentales con los que comparar los resultados numéricos de Σ obtenidos, por la dificultad que presenta la medición experimental del tensor de esfuerzos, obtener mejoras en el modelo de fuerzas para la interacción entre granos a partir del estudio del comportamiento de ϕ resultaría importante para la validación de los resultados numéricos de Σ .

Sería importante también un estudio sobre el comportamiento de las propiedades analizadas en la presente tesis para sistemas tridimensionales, debido a que la mayoría de los trabajos experimentales en este área se realizan en ese tipo de configuraciones.

6.3 COMENTARIOS FINALES

Como hemos dicho al inicio de esta tesis, el estudio de los materiales granulados es una disciplina relativamente nueva. Existe aún mucho por avanzar en el conocimiento de sus propiedades y las leyes que los gobiernan. Esperamos que los resultados y las conclusiones alcanzadas en la presente tesis resulten útiles a trabajos futuros.

Apéndices

A

L A M M P S

LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) es un paquete de código abierto (distribuido bajo GNU public licences), desarrollado por Sandia National Laboratories, para la simulación de modelos de dinámica molecular clásica. LAMMPS presenta implementaciones para funcionar en un sólo procesador o en procesadores paralelos, utilizando técnicas de comunicación entre procesadores *message-passing* y una descomposición espacial para el dominio de simulación. El código, escrito en lenguaje C++, está diseñado para ser fácilmente modificable o extendible con nuevas funcionalidades.

Puede ser compilado como librería para programas fortran95, C, C++, python, etc. También puede ser compilado como un programa ejecutable, y posee su propio lenguaje para los scripts de entrada. Esta modalidad fue la que utilizamos en la presente tesis. Al final del presente apéndice incluimos parte de uno de los script LAMMPS utilizado y comentamos, de forma global, las distintas partes que lo componen.

LAMMPS posee en particular una implementación del modelo de esferas blandas con fricción que es el modelo más utilizado actualmente para la simulación de materiales granulares cuando se realizan estudios donde es necesario tener en consideración fuerzas de contacto sobre los granos. Esta implementación es parte del paquete *Granular*. Para las fuerzas de contacto entre granos (y entre granos y paredes) LAMMPS posee distintos modelos. Uno de los modelos de fuerza que LAMMPS implementa es el llamado *gran/hooke/history* y fue el utilizado en la presente tesis. Este modelo posee fuerzas de interacción normal (y tangencial) con términos restitutivos y disipativos. El término restitutivo de la interacción normal es proporcional a $\Delta r = r_i + r_j - r_{ij}$, donde r_k es el radio de la partícula k ($k = i, j$) y r_{ij} es la distancia entre los centros de las partículas i y j . Este modelo puede implementarse incluyendo o excluyendo fuerzas de roce estáticas o fuerzas de interacción tangencial con las paredes. LAMMPS permite también la implementación del modelo *gran/herzt/history*. Este modelo, a diferencia del anterior, utiliza una fuerza normal restitutiva proporcional al área de solapamiento entre las partículas (no al solapamiento de sus radios).

Dentro del paquete granular, LAMMPS permite la implementación de paredes planas (o cilíndricas), y las constantes de interacción grano-pared pueden fijarse de forma independiente para cada pared implementada. Estas paredes pueden moverse de forma tangencial o normal, en particular siguiendo una forma senoidal (mediante el comando *wiggle*) como es el caso del pulso implementado en la presente tesis. También es posible implementar regiones de simulación más complejas, construidas a partir de mallados o partículas fijas en el espacio. Dentro del paquete granular es posible simular sólo partículas esféricas, pero LAMMPS (a partir de una función dentro del paquete *Rigid*) permite unir partículas para construir granos de formas más complejas (o moléculas). Las listas de vecinos en estos casos poseen optimizaciones que excluyen partículas pertenecientes a la misma molécula.

A continuación se presenta un ejemplo de los scripts LAMMPS utilizados para producir un pulso sobre un sistema cuasi-bidimensional.

```

#####
##### Ejemplo de script utilizado para #####
##### la implementación de los pulsos #####
##### utilizados en la presente tesis #####
##### (versión LAMMPS del 21-8-2012) #####
##### Nombre del script: in.tap #####
#####

#####
##### DEFINICIÓN DEL MODELO Y COMUNICACIÓN ENTRE PROCESADORES #####
#####
atom_style granular
newton off
communicate single vel yes
#####
##### REGIÓN DE SIMULACIÓN Y DEFINICIÓN DE UNIDADES REDUCIDAS #####
#####
boundary f f fm
region reg block -21 21 -0.65 0.65 -15 450 units box
create_box 1 reg
#####
##### LISTA DE VECINOS Y MODELO DE FUERZAS #####
#####
neighbor 0.2 bin
neigh_modify delay 0
pair_style      gran/hooke/history 52358.99 NULL 157 104.7 0.5 1
pair_coeff * *
#####
##### PASO DE TIEMPO, INTEGRADOR (NVE) Y FUERZAS EXTERNAS #####
#####
timestep 0.0001
fix           1 all nve/sphere
fix           2 all gravity 1.0 spherical 0.0 -180.0
#####
##### IMPLEMENTACIÓN DE PAREDES EN UNA CELDA RECTANGULAR #####
#####
fix           xlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
              0.5 1 xplane -6.7 6.7
fix           ylower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
              0.5 1 yplane -0.55 0.55
fix           zlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
              0.5 1 zplane 0.0 NULL
#####

```

```

DEFINICIÓN DE REGIÓN Y MODO DE LLENADO INICIAL DE LA CELDA
#####
region          slab block -6 6 -0.05 0.05 180 350 units box
fix             ins1 all pour 500 1 280523 region slab
#####
CALCULO ENERGÍA CINÉTICA, ROTACIÓN, ESTRÉS
#####
compute         1 all erotate/sphere
compute         2 all ke
compute         stress all stress/atom
#####
INFORMACIÓN EN PANTALLA
#####
thermo_style   custom step atoms c_2 c_1
thermo          50000
thermo_modify   lost ignore norm no
compute_modify  thermo_temp dynamic yes
#####
LLENADO INICIAL DE LA CELDA
#####
label          repitess
run            100000
variable z equal "ke(all)"
variable h equal "atoms"
if             $z > 0.05 then      "jump in.tap repitess"
if             $h < 500 then       "jump in.tap repitess"
#####
GUARDA CONFIGURACIÓN INICIAL
#####
dump           id2 all custom 50000 pours.lammpstrj x y z vx vy vz
dump_modify    id2 first yes
run           1
undump        id2
unfix ins1
#####
IMPLEMENTACIÓN DEL PULSO (CON AMPLITUD A=5 Y PERIODO T=3)
#####
variable a loop 200
label          loopa5
unfix 1
unfix 2
unfix xlower
unfix ylower
unfix zlower
reset_timestep 0
fix 1 all nve/sphere
fix 2 all gravity 1.0 spherical 0.0 -180.0

```

LAMMPS

```

fix           xlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 0.5 1 &
             xplane -6.7 6.7 wiggle z 5 3
fix           ylower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 0.5 1 &
             yplane -0.55 0.55 wiggle z 5 3
fix           zlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 0.5 1 &
             zplane 0.0 NULL wiggle z 5 3      !A=5 Y T=3

run          30000
#####
DEPOSICIÓN
#####
fix           xlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
             0.5 1 xplane -6.7 6.7
fix           ylower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
             0.5 1 yplane -0.55 0.55
fix           zlower all wall/gran 52358.99 NULL 157 104.7 &
             0.5 1 zplane 0.0 NULL
label         repite5
run          50000
if            z > 0.05 then      "jump in.tap  repite5"
#####
GUARDA CONFIGURACIÓN Y ARCHIVO DE RECUPERACIÓN
#####
dump          id3 all custom 50000 file-5.$a id x y z fx fy fz &
             c_stress[1] c_stress[2] c_stress[3] c_stress[4] &
             c_stress[5] c_stress[6]
dump_modify   id3 first yes
run          1
undump        id3
write_restart save5.tap
#####
REPITE EL PULSO
#####
next          a
jump          in.tap  loopa5
variable      repite5  delete

```

B

FLUCTUACIONES DE DENSIDAD Y CRYSTALIZACIÓN

Se nos han planteado discusiones acerca de si la existencia de un máximo en las fluctuaciones de densidad $\Delta\phi$ resulta asociado a fenómenos de cristalización en el sistema (lo que se intuye del alto valor de ϕ que los sistemas alcanzan a bajas Γ). En relación a dichas discusiones simulamos el equivalente de algunos de estos sistemas pero introduciendo en ellos un leve grado de dispersión en el tamaño de las partículas (5 %). La incorporación de esta leve dispersión dificulta al sistema alcanzar altos valores de densidad. Para evitar solapamientos considerables entre partículas, debido a su diferencia de tamaños, utilizamos en estos sistemas polidispersos, una implementación estrictamente bidimensional. El grado de cristalización en el sistema se mide a partir de los valores del parámetro de orden orientacional Q_6 [61] de sus partículas. El parámetro de orden orientacional Q_6 está definido como

$$Q_6 = \left[\frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-6}^6 |\bar{Q}_{6m}|^2 \right]^{0,5},$$

donde \bar{Q}_{6m} es la media sobre los contactos de un grano de $Q_{6m}(r)$ y

$$Q_{6m}(r) = Y_{6m}(\theta(r), \phi(r))$$

son los armónicos esféricos.

En la Fig. 39 se compara el orden de las configuraciones finales alcanzadas entre dos sistemas que se diferencian por ser uno mono-disperso y el otro poli-disperso. Se muestran “fotos” correspondientes a dos valores de Γ en las regiones de alta densidad y de densidades cercanas al ϕ_{min} . Las partículas que poseen un orden cristalino de tipo hexagonal fueron representadas en círculos negros huecos. Puede verse cómo la incorporación de este leve grado de dispersión en el tamaño de las partículas reduce considerablemente su capacidad de cristalización.

En la Fig. 40 (a) se muestra el comportamiento de la función ϕ Vs. Γ para estos dos tipos de sistemas. Resulta clara la disminución de los valores de ϕ alcanzados a bajos Γ al usar partículas polidispersas. En la Fig. 40 puede apreciarse que $\Delta\phi$ en función de ϕ aún presenta un máximo para estos sistemas. Este resultado indica que el máximo de fluctuaciones de densidad reportado no debería atribuirse a un efecto de cristalización.

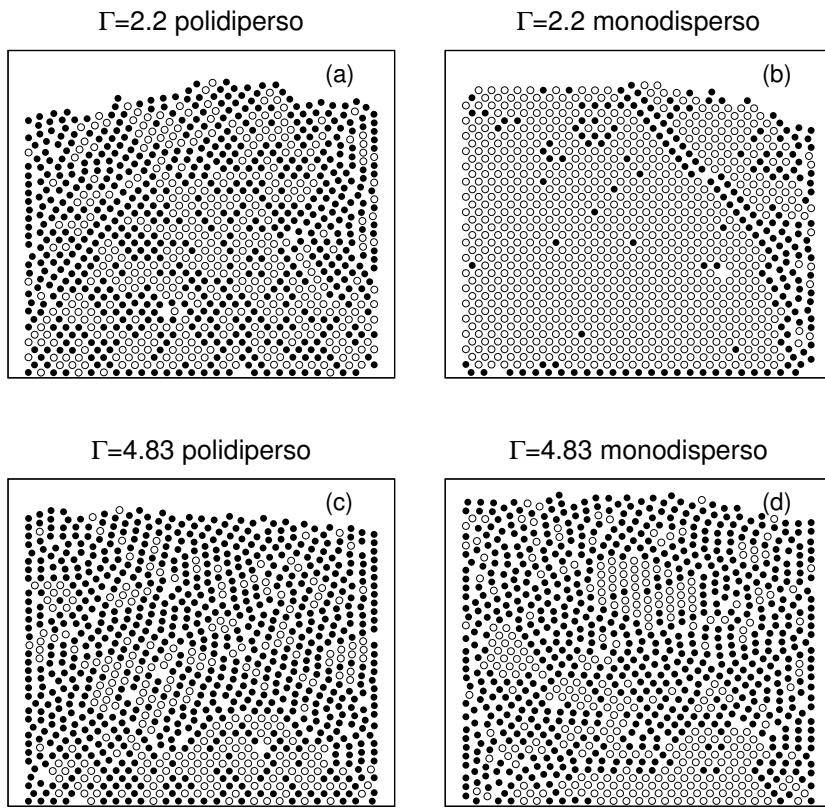


Figura 39.: Diferentes configuraciones finales alcanzadas por sistemas mono y poli dispersos en tamaños, donde las partículas representadas con círculos huecos llenos presentan un valor de parámetro de orden orientacional Q_6 correspondiente a una configuración hexagonal (0.72-0.77). (a) (b) corresponden a bajas intensidades de perturbación mientras que (c) (d) corresponden a valores de ϕ cercanos al mínimo. Para evitar solapamiento, las simulaciones de sistemas polidispersos se llevaron a cabo sobre sistemas estrictamente bidimensionales.

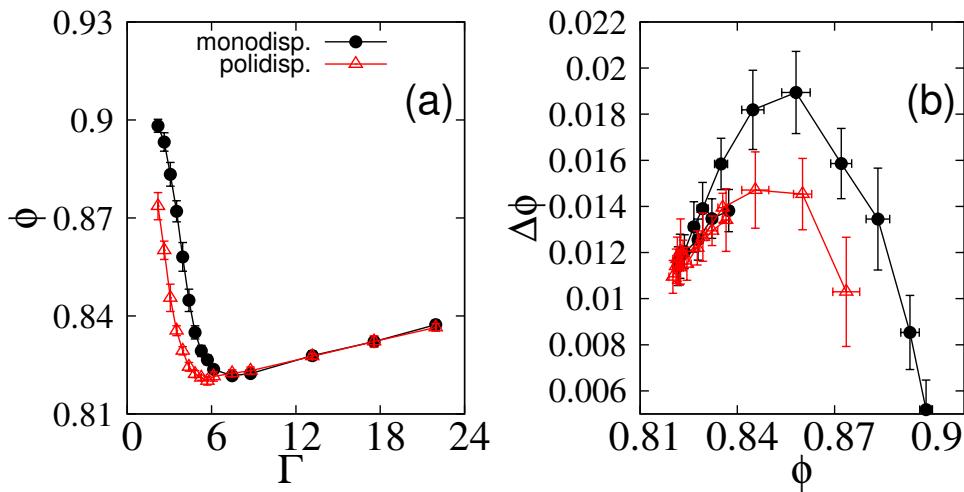


Figura 40.: (a) ϕ Vs. Γ . (b) $\Delta\phi$ en función de ϕ .

BIBLIOGRAFÍA

- [1] O. Reynolds. Experiments showing dilatancy, a property of granular material, possibly connected with gravitation. En *Proc. Royal Institution of Great Britain, Read*, Vol. 12, 1886.
- [2] C.A. Coulomb. In memories de mathematique et de physique. *Academie Royal des Sciences par divers sans*, 7:343–382, 1773.
- [3] E.F.F. Chladni. *Entdeckungen über die Theorie des Klanges*. Zentralantiquariat der Deutschen Demokratischen Republik, 1787.
- [4] R.L. Brown y J.C. Richards. Principles of powder mechanics. Pergamon Press, 1970.
- [5] A. Mehta, G.C. Barker, y J.M. Luck. Heterogeneities in granular dynamics. *Proc. Nat. Ac. Sci.*, 105:8244–8249, 2008.
- [6] F. Paillusson y D. Frenkel. Probing ergodicity in granular matter. *Phys. Rev. Lett.*, 109:208001, 2012.
- [7] A. Kudrolli. Size separation in vibrated granular matter. *Reports Prog. Phys.*, 67:209, 2004.
- [8] B. Blanc y J.C. Géminard. Intrinsic creep of a granular column subjected to temperature changes. *Phys. Rev. E*, 88:022201, 2013.
- [9] A. Mehta. The physics of powders. En *Correlations and Connectivity*, Pags. 88–107. Springer, 1990.
- [10] <http://www.reocities.com/petersonpipe>.
- [11] <http://www.mims.manchester.ac.uk/research/applied>.
- [12] I. Zuriguel, J.M.N.T. Gray, J. Peixinho, y T. Mullin. Pattern selection by a granular wave in a rotating drum. *Phys. Rev. E*, 73:061302, 2006.
- [13] T.S. Majmudar y R.P. Behringer. Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, 435:1079–1082, 2005.
- [14] L.A. Pugnaloni, M. Mizrahi, C.M. Carlevaro, y F. Vericat. Nonmonotonic reversible branch in four model granular beds subjected to vertical vibration. *Phys. Rev. E*, 78:051305, 2008.
- [15] C.M. Carlevaro y L.A. Pugnaloni. Arches and contact forces in a granular pile. *Eur. Phys. E*, 35:1–7, 2012.
- [16] C. Perge, M.A. Aguirre, P.A. Gago, L.A. Pugnaloni, D. Le Tourneau, y J.C. Géminard. Evolution of pressure profiles during the discharge of a silo. *Phys. Rev. E*, 85:021303, 2012.
- [17] H.A. Janssen. Versuche über getreidedruck in silozellen. *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure*, 39:1045–1049, 1895.
- [18] Y. Bertho, F. Giorgiutti-Dauphiné, y J.P. Hulin. Dynamical janssen effect on granular packing with moving walls. *Phys. Rev. Lett.*, 90:144301, 2003.

- [19] E.R. Nowak, J.B. Knight, M.L. Povinelli, H.M. Jaeger, y S.R. Nagel. Reversibility and irreversibility in the packing of vibrated granular material. *Powder Tech.*, 94:79–83, 1997.
- [20] J.G. Berryman. Random close packing of hard spheres and disks. *Phys. Rev. A*, 27:1053, 1983.
- [21] S. Torquato, T.M. Truskett, y P.G. Debenedetti. Is random close packing of spheres well defined? *Phys. Rev. Lett.*, 84:2064, 2000.
- [22] P. Richard, M. Nicodemi, R. Delannay, P. Ribiere, y D. Bideau. Slow relaxation and compaction of granular systems. *Nat. Mat.*, 4:121–128, 2005.
- [23] M.P. Ciamarra, A. Coniglio, y M. Nicodemi. Thermodynamics and statistical mechanics of dense granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 97:158001, 2006.
- [24] M. Schröter, D.I. Goldman, y H.L. Swinney. Stationary state volume fluctuations in a granular medium. *Phys. Rev. E*, 71:030301, 2005.
- [25] L.A. Pugnaloni, I. Sánchez, P.A. Gago, J. Damas, I. Zuriguel, y D. Maza. Towards a relevant set of state variables to describe static granular packings. *Phys. Rev. E*, 82:050301, 2010.
- [26] L.A. Pugnaloni, J. Damas, I. Zuriguel, y D. Maza. Master curves for the stress tensor invariants in stationary states of static granular beds. implications for the thermodynamic phase space. *Papers in Physics*, 3:030004, 2011.
- [27] M. Shahinpoor. Statistical mechanical considerations on the random packing of granular materials. *Powder Tech.*, 25:163–176, 1980.
- [28] S.F. Edwards y R.B.S. Oakeshott. Theory of powders. *Physica A*, 157:1080–1090, 1989.
- [29] F. Lechenault y K.E. Daniels. An experimental test of volume-equilibration between granular systems. *arXiv preprint arXiv:0905.1829*, 2009.
- [30] R. Blumenfeld y S.F. Edwards. On granular stress statistics: compactivity, angoricity, and some open issues. *Jour. Phys. Chem. B*, 113:3981–3987, 2009.
- [31] R.K. Bowles y S.S. Ashwin. Edwards entropy and compactivity in a model of granular matter. *Phys. Rev. E*, 83:031302, 2011.
- [32] F. Lechenault, F. da Cruz, O. Dauchot, y E. Bertin. Free volume distributions and compactivity measurement in a bidimensional granular packing. *Stat. Mech.*, 2006:P07009, 2006.
- [33] S. McNamara, P. Richard, S.K. De Richter, G. Le Caér, y R. Delannay. Measurement of granular entropy. *Phys. Rev. E*, 80:031301, 2009.
- [34] Ph. Ribière, P. Richard, P. Philippe, D. Bideau, y R. Delannay. On the existence of stationary states during granular compaction. *Eur. Phys. E*, 22:249–253, 2007.
- [35] J.A. Dijksman y M. van Hecke. The role of tap duration for the steady-state density of vibrated granular media. *Europhys. Lett.*, 88:44001, 2009.
- [36] F. Ludewig, S. Dorbolo, T. Gilet, y N. Vandewalle. Energetic approach for the characterization of taps in granular compaction. *Europhys. Lett.*, 84:44001, 2008.
- [37] M. Nicodemi, A. Coniglio, y H.J. Herrmann. Frustration and slow dynamics of granular packings. *Phys. Rev. E*, 55:3962–3969, 1997.

- [38] J. Brey, A. Prados, y B. Sanchez-Rey. Thermodynamic description in a simple model for granular compaction. *Physica A*, 275:310–324, 2000.
- [39] P.A. Gago, N.E. Bueno, y L.A. Pugnaloni. High intensity tapping regime in a frustrated lattice gas model of granular compaction. *Gran. Matt.*, 11:365–369, 2009.
- [40] T.A.J. Duke, G.C. Barker, y A. Mehta. A monte carlo study of granular relaxation. *Europhys. Lett.*, 13:19, 1990.
- [41] L.A. Pugnaloni, M.G. Valluzzi, y L.G. Valluzzi. Arching in tapped deposits of hard disks. *Phys. Rev. E*, 73:051302, 2006.
- [42] C.M. Carlevaro y L.A. Pugnaloni. Steady state of tapped granular polygons. *Stat. Mech.*, 2011:P01007, 2011.
- [43] J.B. Knight, C.G. Fandrich, C.N. Lau, H.M. Jaeger, y S.R. Nagel. Density relaxation in a vibrated granular material. *Phys. Rev. E*, 51:3957, 1995.
- [44] N.V. Brilliantov, F. Spahn, J.M. Hertzsch, y T. Pöschel. Model for collisions in granular gases. *Phys. Rev. E*, 53:5382, 1996.
- [45] J. Shäfer, S. Dippel, y D.E. Wolf. Force schemes in simulations of granular materials. *Physique I*, 6:5–20, 1996.
- [46] L.E. Silbert, D. Ertaş, G.S. Grest, T.C. Halsey, D. Levine, y S.J. Plimpton. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. *Phys. Rev. E*, 64:051302, 2001.
- [47] R. Balian. *From Microphysics to Macrophysics: Methods and Applications of Statistical Physics. Texts and Monographs in Physics*. 1982.
- [48] A. Mehta. *Granular physics*. Cambridge University Press, New York, 2007.
- [49] S.F. Edwards. The full canonical ensemble of a granular system. *Physica A*, 353:114–118, 2005.
- [50] J.G. Puckett y K.E. Daniels. Equilibrating temperaturelike variables in jammed granular subsystems. *Phys. Rev. Lett.*, 110:058001, 2013.
- [51] T. Pöschel y T. Schwager. *Computational granular dynamics*. Berlin, Springer, 2005.
- [52] P.A. Cundall y O.D.L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65, 1979.
- [53] S. Plimpton, P. Crozier, y A. Thompson. Lammps-large-scale atomic/molecular massively parallel simulator. *Sandia National Laboratories*, 2007.
- [54] M.P. Allen y D.J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Clarendon press Oxford, 1989.
- [55] G. Pérez. Numerical simulations in granular matter: The discharge of a 2d silo. *Pramana*, 70:989–1007, 2008.
- [56] L. Silbert. Comunicación privada.
- [57] W.R. Hamilton. On quaternions. En *Proceedings of the Royal Irish Academy*, Vol. 3, Pags. 1–16, Addison-Wesley, 1847.
- [58] E.R. Nowak, J.B. Knight, E. Ben-Naim, H.M. Jaeger, y S.R. Nagel. Density fluctuations in vibrated granular materials. *Phys. Rev. E*, 57:1971, 1998.

Bibliografía

- [59] G. Voronoi. Nouvelles applications des paramètres continus à la theorie des formes quadratiques. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, Pag. 97–178, 1907.
- [60] C. Rycroft. Voro++: A three-dimensional voronoi cell library in c++. 2009.
- [61] P.J. Steinhardt, D.R. Nelson, y M. Ronchetti. Bond-orientational order in liquids and glasses. *Phys. Rev. B*, 28:784, 1983.