

UNIVERSIDAD DE CHILE FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS ESCUELA DE POSTGRADO

MEDIOS GRANULARES DENSOS: MODELAMIENTO CONTINUO ESTACIONARIO Y APROXIMACIÓN A REOLOGÍA TRANSIENTE

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN FLUIDODINÁMICA

EDUARDO ANDRÉS ROJAS PARRA

PROFESOR GUÍA RODRIGO SOTO BERTRÁN

MIEMBROS DE LA COMISIÓN

ALDO TAMBURRINO TAVANTZIS NICOLÁS MUJICA FERNÁNDEZ FRANCISCO MARTÍNEZ CARREAUX ERIC CLÉMENT

Este trabajo ha sido financiado por la Beca de Doctorado Nacional CONICYT

SANTIAGO DE CHILE 2015

Π

RESUMEN DE LA TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO DE DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN FLUIDODINÁMICA POR: EDUARDO ANDRÉS ROJAS PARRA FECHA: SEPTIEMBRE 2015 PROF. GUÍA: SR. RODRIGO SOTO BERTRAN

MEDIOS GRANULARES DENSOS: MODELAMIENTO CONTINUO ESTACIONARIO Y APROXIMACIÓN A REOLOGÍA TRANSIENTE

El estudio de la reología de medios granulares densos tuvo un fuerte impulso a raíz de la aparición del modelo reológico propuesto en *GDR MiDi*, 2004, el cual estableció una relación local entre el esfuerzo de corte normalizado por la presión y el número de inercia. Esta relación se cumple satisfactoriamente para distintos escurrimientos, cuando se presentan bajos gradientes de la velocidad de deformación. Por otro lado, este modelo resulta insatisfactorio para problemas con altos gradientes de la velocidad de deformación. Para estos últimos casos se han propuestos diversos modelos denominados no locales.

El objetivo de la presente tesis es evaluar el desempeño de modelos reológicos, tanto locales como no locales, para sistemas distintos a los que dieron su origen, utilizando la modelación continua y discreta del medio granular, de la forma en que se explica a continuación:

Problemas resueltos mediante modelación continua: El modelo local ya mencionado fue evaluado para dos sistemas estacionarios, estos son: (1) escurrimiento en celda Couette modificada y (2) flujo gravitacional en celda tipo block caving. La metodología en estos casos consistió en resolver numéricamente un modelo continuo, compuesto fundamentalmente por la ecuación de conservación de momentum del medio granular y la reología local incorporada a esta ecuación. Finalmente, se compararon los resultados de los modelos con datos obtenidos a partir de simulaciones discretas y experimentos.

Problema resuelto mediante modelo discreto: En este caso el problema a resolver fue un sistema en estado transiente, compuesto por un medio granular bajo cizalle simple. De forma instantánea el medio granular es sometido a un cambio en el sentido de cizalle, generándose un periodo de relajación del sistema hasta volver al estado original. Para la simulación de este caso se utilizó un modelo de dinámica molecular, en el cual fueron creadas distintas configuraciones variando la altura del sistema y la densidad global del medio granular.

Referente a los resultados obtenidos para el modelo de la celda Couette modificada, se logró predecir el campo de velocidades de rotación en los casos clasificados dentro del régimen demominado *abierto*, por el contrario, se encontraron importantes discrepancias en los regímenes de *transición* y *cerrado*. En cuanto al modelo para el problema de block caving, este arrojó una *zona de extracción aislada* de tamaño similar a la encontrada experimentalmente, además este modelo logró predecir el ángulo de falla a la salida del sistema.

Con respecto al problema abordado con enfoque discreto, el principal resultado encontrado es que el medio granular relaja en dos fases asociadas a dos tipos de reologías. En una primera fase, el esfuerzo de corte normalizado en el centro del sistema se mueve siguiendo una nueva relación no local. En esta relación aparece el laplaciano del esfuerzo de corte normalizado, como una nueva variable. En una segunda fase, el esfuerzo de corte normalizado satisface la relación local dependiente del número de inercia antes señalada.

Dedicada a mi hijo Nahuel.

VI

Tabla de contenido

1.	Intro	oducció	n 1
	1.1.	Medio	s granulares
		1.1.1.	Medios granulares y su modelación
		1.1.2.	Clasificación de medios granulares
	1.2.	Objetiv	yos del presente estudio
		1.2.1.	Objetivos generales
		1.2.2.	Objetivos específicos
	1.3.	Metode	ología general
		1.3.1.	Metodología para problemas estacionarios
		1.3.2.	Metodología para problema transiente
		1.3.3.	Estructuración del texto de la tesis
2.	Mod	lelamier	nto de medios granulares 10
	2.1.	Model	os discretos \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 10
		2.1.1.	Dinámica molecular (dinámica de granos blandos)
		2.1.2.	Dinámica molecular de granos duros o dirigida por eventos
		2.1.3.	Dinámica de contacto
	2.2.	Model	os continuos
		2.2.1.	Modelo visco-plástico
		2.2.2.	Modelos de dos fases
		2.2.3.	Modelos no locales
3.	Sim	ulacione	es continuas de fluios granulares densos 23
	3.1.	Flujo e	n celda tipo Couette modificada
		3.1.1.	Descripción del problema
		3.1.2.	Regímenes de flujo
		3.1.3.	Modelo continuo local
		3.1.4.	Resolución numérica mediante volúmenes finitos
		3.1.5.	Resultados
	3.2.	Block	caving
		3.2.1.	Importancia del modelamiento del flujo granular en problemas de block
			caving
		3.2.2.	Modelo continuo
		3.2.3.	Resolución numérica
		3.2.4.	Resultados

4.	Rela	ijación (en medio granular cizallado	50
	4.1.	Motiva	ución	50
	4.2.	Caso d	e estudio	50
		4.2.1.	Configuración del sistema	50
		4.2.2.	Experimento numérico	51
	4.3.	Medici	ión de variables	53
	4.4.	Estado	estacionario del sistema	55
	4.5.	4.5. Evolución espacial y temporal de variables		
4.6. Relajación de la zona central del sistema		Relaja	ción de la zona central del sistema	61
		4.6.1.	Relajación de la densidad volumétrica en el centro del sistema	61
		4.6.2.	Relajación para el esfuerzo de corte normalizado en el centro del sistema .	64
		4.6.3.	Relajación de otras variables de importancia	68
		4.6.4.	Relación de difusión	70
		4.6.5.	Test para modelo no local basado en el laplaciano del número de inercia	78
		4.6.6.	Nueva relación no local dependiente del laplaciano del esfuerzo de corte	
			normalizado	81
5.	Conclusiones 8			83
	5.1.	5.1. Simulación continua de medios granulares estacionarios		83
		5.1.1.	Simulación de celda Couette modificada	83
		5.1.2.	Simulación de flujo granular en sistema de extracción minera tipo block	
			caving	84
		5.1.3.	Trabajos a futuro	84
	5.2.	Simula	ción discreta de un medio granular denso sometido a una inversión del sen-	
		tido de	cizalle	85
		5.2.1.	Relajación de la densidad volúmetrica	85
		5.2.2.	Relajación del esfuerzo de corte normalizado	86
		5.2.3.	Reología del sistema	86
		5.2.4.	Trabajos a futuro	86
Bi	bliogı	rafía		88

Lista de figuras

1.1.	Caldera de lecho fluidizado circulante a carbón (figura extraída de [6])	4
1.2.	Pila 2D de partículas foto-elásticos. a) Partículas circulares, b) partículas de forma	
	elíptica (figura extraída de [8])	5
1.3.	Perfiles horizontales de fuerza normal promediados sobre 500 repeticiones para	
	una pila de 3000 partículas de forma de disco (2500 de diametro $6.9 \pm 0.1[mm]$	
	y 500 de diámetro $8.9 \pm 0.1[mm]$). Los puntos representan datos experimentales a	
	distintas alturas de la pila. Cuadrados: $h = 3.5[cm]$, círculos: $h = 7.0[cm]$, triángu-	
	los: $h = 10.5[cm]$ y diamantes: $h = 14.0[cm]$. Las líneas representan la distribución	
	exponencial de fuerzas normales predecida por el q-model (figura extraída de [8])	6
1.4.	Ejemplos de configuraciones para las cuales el medio granular es considerado den-	
	tro del régimen líquido. Flujos confinados: a) cizalle simple, b) celda tipo Couette	
	y c) silo; flujos con superficie libre: d) avalancha, e) flujo sobre pila y f) tambor	_
	rotatorio (figura extraída de [12])	7
2.1.	Esquema de velocidades para choque sin solapamiento entre dos partículas. En la	
	figura \vec{v}_i^0 y \vec{v}_i representan las velocidades antes de la colisión y después de esta	
	para la partícula i (la misma nomenclatura se repite la la partícula j), mientras que	
	vector unitario \hat{n} va desde el centro de la partícula <i>i</i> hasta el centro de la partícula <i>j</i> .	13
2.2.	Celda de corte simple para un medio granular. Los círculos sin relleno representan	
	paredes, mientras los con relleno se pueden mover libremente. La pared inferior se	
	mantiene fija, mientras que a la pared superior se le impone una velocidad horizan-	
	tal V y además una presión externa p	15
2.3.	Reposicionamiento de una partícula dentro de un agujero del medio granular.	16
2.4.	Esquema representativo de las curvas encontradas al graficar las expresiones 2.12	
	y 2.13 a partir de datos experimentales y simulaciones discretas. a) Curva $\mu = \mu(I)$,	17
25	b) curva $\varphi = \varphi(I)$	1/
2.3.	ción para la pared interna y el eje r a la velocidad de deformación adimensional	
	Los círculos abiertos representan el sentido donde \dot{v} es creciente mientras que los	
	círculos rellenos representan el proceso donde $\dot{\gamma}$ es decreciente. Las figuras b) y c)	
	dan cuenta del fenómeno de no localidad al existir una dependencia geométrica de	
	las curvas. Círculos abiertos θ_{start} y círculos rellenos θ_{star}	18
2.6.	Perfiles de velocidad para problemas con gradientes pronunciados de velocidad de	
	deformación. Líneas: valores observados experimentalmente y con simulaciones	
	discretas, puntos: predicción de acuerdo a reología local [36]	20

2.7.	Reómetro con medio granular cizallado indirectamente. a) Esquema del reómetro, b) perfil de esfuerzo de cizalle y presión [38]	21
3.1.	Celda Couette modificada (figura extraída de [39]).	23
5.2.	H/R_d (figura extraída de [39])	24
3.3. 3.4.	Arbol de dependencia de η	26
3.5.	Los colores corresponden a los mismos rangos indicados para la figura superior Velocidad de rotación en la superficie libre del medio granular normalizada por	32
	la velocidad del disco versus la relación H/R_d . Círculos: simulaciones continuas, puntos: simulaciones discretas realizadas por <i>Cheng et al.</i> , 2006 [40].	32
3.6.	Resultados para simulaciones continuas obtenidos en <i>Jop</i> ,2008 [39]. a-c) Velocidad de rotación normaliza $\Omega' = \Omega / \sqrt{g/d}$ v/s distancia radial y altura normalizada por el diámetro de las partículas $(r/d \ y \ z/d)$. a) $H/R_d = 0.59$, b) $H/R_d = 0.706$ y c) $H/R_d = 0.73$. d) Posición de la banda de cizalle. Línea contínua: $H/R_d=0.39$, 0.5, 0.59, 0.63, 0.66 (sistema abierto), 0.73, 0.78, 0.84 (sistema cerrado). Línea segmentada:	
3.7.	H/R_d =0.700, 0.706, 0.714 (transición). Línea punteada: posición de la banda de cizalle en la superficie obtenida experimentalmente [41]. (figura adaptada de [39]). Velocidad de rotación normalizada ω/Ω para celda Couette modificada para los	34
	parámetro H/R_d considerados en <i>Jop</i> , 2008 [39], utilizando la reología local $\mu = \mu(I)$ y la resolución numérica detallada en el punto 3.1.4.	35
3.8.	Velocidad de rotación normalizada ω/Ω para celda Couette modificada para valores del parámetro H/R_d mayores a los considerados en <i>Jop</i> , 2008 [39], utilizando la reología local $\mu = \mu(I)$ y la resolución numérica detallada en el punto 3.1.4	35
3.9.	Esquema para planta industrial de extracción minera tipo subterránea con tecnolo- gía Block Caving (Euente: http://technology.infomine.com/reviews/Blockcaving/)	33
3.10.	Esquema para volúmenes: 1) zona de movimiento aislada (IMZ) y 2) zona de ex-	20
3.11.	Esquema del sistema considerado para la simulación del proceso de block caving.	38 39
3.12. 3.13.	Arbol de dependencia de η	40
311	zontal, abajo: velocidad vertical.	45 46
3.14. 3.15.	Contornos <i>IEZ</i> medidos en kilógramos de masa extraída. Arriba: simulaciones con modelo continuo. Abajo: valores obtenidos de datos experimentales (<i>Castro et al.</i> , 2006 [48])	40
	2000 [48])	4/

3.16.3.17.	Resultados para modelo difusivo aplicado a un medio granular de un experimento tipo block caving, donde fluyen partículas de arena. Líneas delgadas: trayectorias de las partículas, líneas gruesas: curvas de nivel de masa extraída (IEZ) [49] Contorno para la divergencia de la velocidad normalizada $\frac{\nabla \cdot \vec{v}}{v_0/e}$. Arriba: Dominio espacial completo, abajo: zoom para la salida del sistema,	48 49
4.1.	a) Configuración usada para las simulaciones. Base $L = 45d$ y alturas $H_1 = 18d$ y $H_2 = 40d$. La pared está formada por partículas con las mismas características del medio interior y se define considerando los granos con centro de gravedad dentro de un espesor $W = 1.5d$ medido desde los bordes exteriores. b) Velocidad de deformación impuesta sobre las paredes $\dot{y}_{11} = \pm 2U_{11}/H$	51
4.2.	Caja o box k horizontal del sistema. El sistema fue dividido en su totalidad en cajas	51
4.3.	Perfil espacial estacionario para la densidad volumétrica ϕ . Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice θ representa el valor puntual en el box	55
4.4.	Perfil espacial estacionario para el esfuerzo de corte normalizado μ . Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice <i>0</i> representa el valor puntual	22
4.5.	en el box central del sistema. Código de colores especificado en figura 4.3 Perfil espacial estacionario para el número de inercia <i>I</i> . Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice <i>0</i> representa el valor puntual en el box central	56
4.6.	del sistema. Código de colores especificado en figura 4.3	57
4.7.	continuas representan ajustes líneales para los casos en los cuales se consideran las variables promediadas en todo el medio granular	57
	promediando las variables en el tercio central de la altura del sistema. Círculos: $H = 18d$, triángulos: $H = 40d$. La línea contínua representa la realción $\mu = \mu_1 - (\mu_2 - \mu_1)/(1 + I_0/I)$ con parámetros de ajuste encontrados en <i>Troulsson et al.</i> , 2012 [18].	58
4.8.	Evolución temporal y espacial luego de cambio instantáneo en la dirección de la velocidad de corte. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.790$. ϕ : fración volumétrica; u/U_w : velocidad horizontal y v/U_w : velocidad vertical, ambas normalizadas por la velocidad de la pared U_w ; $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c^{ss}$: velocidad de deformación; <i>I</i> : número de inercia; τ/τ_c^{ss} : esfuerzo de corte; p/p_c^{ss} : presión vertical y $\mu = \tau/p$: esfuerzo de corte normalizado. $\dot{\gamma}_c^{ss}$, τ_c^{ss} y p_c^{ss} representan valores promediados en el tercio central del espacio en estado estacionario	50
4.9.	Evolución temporal y espacial luego de cambio instantáneo en la dirección de la velocidad de corte. $H_2 = 40d$, $\phi_G = 0.796$. ϕ : fración volumétrica; u/U_w : velocidad horizontal y v/U_w : velocidad vertical, ambas normalizadas por la velocidad de la pared U_w ; $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c^{ss}$: velocidad de deformación; <i>I</i> : número de inercia; τ/τ_c^{ss} : esfuerzo de corte; p/p_c^{ss} : presión vertical y $\mu = \tau/p$: esfuerzo de corte normalizado. $\dot{\gamma}_c^{ss}$, τ_c^{ss} y p_c^{ss} representan valores promediados en el tercio central del espacio en estado	39
	estacionario.	60

4.10. Zona central del sistema definida como 1/3 de la altura del sistema	61
a): $H_1 = 18d$ y figura b): $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.	61
4.12. Perfiles de velocidad vertical. Figura a): perfiles desde el instante inicial hasta al-	
canzar $t(\phi_c^{MAX})$, figura b): desde $t(\phi_c^{MAX})$ hasta el estado estacionario. Linea azul: perfil estacionario y línea roja:perfil para $t(\phi_c^{MAX})$. $H_c = 18d_c\phi_c = 0.797$	62
4.13. Perfiles de densidad volumétrica. Figura a): perfiles desde el instante inicial hasta	02
alcanzar $t(\phi_c^{MAX})$, figura b): desde $t(\phi_c^{MAX})$ hasta el estado estacionario. Línea azul:	
perfil estacionario y línea roja:perfil para $t(\phi_c^{MAX})$. $H_1 = 18d, \phi_G = 0.797.$	63
4.14. Evolución temporal de $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}$. figura a): $H_1 = 18d$ y figura b): $H_2 = 40d$.	()
Código de colores especificado en figura 4.3	63
4.15. $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{-1}$ en funcion del tiempo. $H_1 = 16a$. t_{ϕ_1} , tiempo normanzado entre en intante inicial y el instante antes de alcanzar el máximo valor de densidad volu-	
métrica en el tercio central del espacio. τ_{d2} : decaimiento exponencial normalizado	
después alcanzar el máximo valor de densidad volumétrica en el tercio central del	
espacio. Líneas continuas: ajuste exponencial $\phi^{fit}(t\dot{\gamma}_c^{ss}) = \exp((t-t_0)\dot{\gamma}_c^{ss}/\tau_{\phi 2})$	64
4.16. Tiempos característicos para el proceso de relajación de la densidad volumétrica.	
Círculos: $H_1 = 18d$, triángulos: $H_2 = 40d$. a) Tiempo de relajación para la primera	65
Tase de $\tau_{\phi 1}$. D) Tiempo de relajación para la primera fase de $\tau_{\phi 2}$	03
nea continua negra corresponde a la curva $\phi = \phi(I)$ para estado estacionario. Círcu-	
los: puntos estacionarios finales. $H_1 = 18d$.	65
4.18. Evolución temporal del esfuerzo de corte normalizado μ_c evaluado en el centro del	
sistema y normalizado por su valor estacionario μ_c^{ss} . a) $H_1 = 18d$, b) $H_2 = 40d$.	
Código de colores especificado en figura 4.3.	66
4.19. Estuerzo de corte normalizado μ_c versus numero de inercia I_c , ambas variables promediadas en el centro del sistema. La línea continua corresponde a la curva	
$\mu = \mu(I)$ para estado estacionario. Círculos: puntos estacionarios. $H_1 = 18d$. Código	
de colores especificado en figura 4.3.a. \ldots	67
4.20. Evolución temporal para la variable $\Delta \mu = \frac{\mu(I_c(t)) - \mu_c}{\mu(I_c(t))}$. a) $H_1 = 18d$, b) $H_2 = 40d$.	
Código de colores especificado en figura 4.3.	67
4.21. Evolución temporal de la variable $\Delta \mu = \frac{\mu(I_c(t)) - \mu_c}{\mu(I_c(t))}$ en el tercio central del espacio.	
Los puntos representan resultados de las simulaciones, mientras que las líneas re-	
presentas las curvas de ajuste del upo: $\Delta \mu^{\gamma} = a \exp((i\gamma_c - \tau_0)/\tau_{\mu 1})$. a) $H_1 = 18a$, b) $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3	68
4.22. Tiempos de relajación para la primera fase de relajación. Los círculos representan	00
los puntos para $H_1 = 18d$, mientras que los triángulos representan los puntos para	
$H_2 = 40d$ a) τ_{μ_1} versus la distancia al valor crítico de densidad volúmetrica global	
del sistema, b) relación entre los tiempos de relajación para la fase 1 τ_{ϕ_1} y τ_{μ_1} . La	
línea recta representa la relación $\tau_{\phi_1} = 3.4\tau_{\mu_1}$	69

4.23. Evolució	n temporal de variables dinámicas y cinemáticas. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.790$.	
El instan	te a representa el tiempo para el cual el número de inercia cambia de	
signo (t_a	= t(I = 0)), en b se alcanza la densidad máxima en el centro del sistema	
$(t_b = t(\phi$	$=\phi_c^{MAX}$)), en $c \Delta \mu$ alcanza el valor nulo $(t_c = \min(t(\Delta \mu = 0)))$ y en d el	
esfuerzo	de corte llega a su valor estacionario ($t_d = t(\tau_c = \tau_c^{ss})$). Todas las variables	
están eva	luadas en el tercio central del medio granular, salvo la velocidad vertical	
<i>v</i> , que est	tá evaluada a un cuarto de la altura	70
4.24. Evolució	n temporal de la presión $p = p_{yy}$ normalizada por su valor estacionario p^{33} .	
a): $H = 1$	8d y b): $H = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3	71
4.25. Test para	escala de presión de Bagnolds. $\hat{p} = p/p^{ss}(\phi_c^{cl} - \phi_c)^2/(\phi_c^{cl} - \phi_c^{ss})^2$ versus	
$sgn(\dot{\gamma}_c)(\dot{\gamma}_c)$	$(\gamma_c/\gamma_c)^2$. Línea negra: evolución según escala de Bagnolds. a: $H_1 = 18d$ y	
b: $H_2 = 4$	<i>Ud.</i> Código de colores especificado en figura 4.3.	72
4.26. a) Flujo	vertical ϕv expression en unidades $[d\gamma_c^{ss}]$ versus gradiente espacial de la	
densidad	volumetrica $\partial \phi / \partial y$ [<i>a</i> ⁻¹]. $H_1 = 18a$. b) Flujo vertical ϕv [$d\gamma_c^{ss}$] versus	
	espacial de la densidad volumetrica $\partial \phi / \partial y [a^{-1}]$ multiplicado por D_{ef}	77
$[a^-\gamma_c^{**}]$. I	Lineas azures: $H_1 = 18a$ y rineas rojas: $H_2 = 40a$	13
4.27. Coefficien	ne de difusion electiva $D_{ef}[a \ \gamma_c]$ para $H_1 = 18a$ (circulos) y $H_2 = 40a$	
(unangun	Js), calculado dividiendo el medio granular en dos partes simetricas. Zona	
central y	zona pared. El gradiente $\frac{\partial}{\partial y}$ lue obtenido mediante la diferencia de ϕ entre	77
4 29 Tiampo	zonas y φv lue medido en la zona de intersección	13
4.20. Thempo (The relation $t_{\phi 2}$ para $H_1 = 160$ (circulos) y para $H_2 = 400$ (trangulos),	
una relac	sión lineal. La línea contínua representa el tiempo difusivo $\pi_{\rm MC}$ calculado	
usando I) c y la altura efectiva $\tilde{H} = 1.2H$	74
4 29 Esquema	del intercambio de partículas entre dos capas advacentes	76
4.30. Fluio ver	tical $\phi v [d\dot{v}^{ss}]$ en función del gradiente de velocidad de deformación nor-	70
malizado	b. Línea contínua negra: $\phi v = \alpha \frac{D_{\text{eff}}}{T} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial \dot{y}}{\partial z} - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial \dot{y}}{\partial z} \right) \right), \alpha = 0.9d$. a) $H_1 = 18d$.	
b) color :	$H_1 = 18d \text{ color roio: } H_2 = 40d$	77
$431 \Lambda \phi - \phi$	$-\phi^{ss}$ versus $\ln(\frac{\dot{\gamma}_{ss}^{ss}}{2})$ en el centro del sistema (10% de H). Izquierda solo	, ,
$4.51. \ \Delta \varphi = \varphi_c$ $H = 18d$	ψ_c versus \prod_{ij_c}) en el centro del sistema (10 % de 11). Equivida solo derecha: azul $H_1 = 18$ y rojo $H_2 = 40d$	78
A 32 Evolució	n temporal de $\frac{1}{2}\frac{\partial^2 I}{\partial x}(x=0) \approx \frac{2b}{2}$ en el centro del sistema obtenido a partir	10
4.52. Evolucio	In temporar de $\frac{1}{I}\frac{\partial y^2}{\partial y^2}(y=0) \sim \frac{1}{a}$ en el centro del sistema, obtendo a partir	
de las fui	actiones de ajuste: $I^{j \mu \tau} = a + by^2 + cy^2 + dy^3$ y $I^{j \mu 2} = a + by^2 + cy^2$, consi-	00
derando 1	los intervalos de ajuste indicados en cada figura. $\phi_G = 0.767$ y $H_1 = 18d$.	80
4.33. Evolucio	n temporal de la variable $\Delta \mu$. $\phi_G = 0.767$ y $H_1 = 18a$	81
4.34. Test no 1 $H_{\rm c} = 40c$	ocal: $\Delta \mu \ v/s \ a^{-}v^{-}I/I$ para $y = 0$. a) $H_1 = 18a$, b) azul: $H_1 = 18a$, rojo:	01
$11_2 = 400$	$= u v s \alpha H^2 \nabla^2 u \text{ con } u = u(I) v \alpha = 0.04 \text{ Todas las avpresiones entén}$	01
$\mu_{lc} = \mu_{lc}$	$p_c = \mu v_1 s u \pi v_1 \mu_1$, con $\mu_{loc} = \mu(1) y u = 0.04$. Totas las expresiones entants en el centro del sistema (y=0). A zul: $H_c = 18d$ roio: $H_c = 40d$	ดา
Cvaluaua	5 cm cm cm to uci sistema (y=0). Azui, $H_1 = 160, 1000, H_2 = 400, \dots, \dots, \dots$	04

Capítulo 1

Introducción

1.1. Medios granulares

1.1.1. Medios granulares y su modelación

Según *Ellenbroek, W. G. (2007)* [1], un medio granular se puede definir como un material compuesto por muchas partículas separadas, las cuales son lo suficientemente grandes para no presentar desplazamientos debido a su temperatura. Esto implica que la energía térmica de las partículas es mucho menor que la energía gravitatoria o la energía elástica debida a las interacciones entre granos.

Los medios granulares, definidos en el sentido descrito en el párrafo anterior, están presentes en un amplio espectro de escenarios que abarcan tanto la naturaleza, como el ámbito industrial e incluso el doméstico. Partamos esbozando los casos de fenómenos naturales que son comunmente estudiados como medios granulares.

Los fenómenos naturales donde es relevante considerar la naturaleza granular del medio son innumerables, pero citemos para empezar solo algunos casos que involucran una alteración importante en el medio ambiente:

- Avalanchas en general, que incluyen deslizamiento de tierras y aluviones.
- Fluidización de terrenos debida a sismos.
- Fallas tectónicas.

Es posible además que los granos presenten interación con algún fluido. En este caso podemos encontrar, entre otros, los fenómenos donde el medio es fundamentalmente fluido y los granos son movilizados por acción de las fuerzas de interacción fluido-partícula. Como ejemplos típicos tenemos:

- Transporte de sedimentos en ríos, lagos y océanos.
- Formación de dunas en desiertos y costas.

Dicho lo anterior, resulta interesante plantearse las siguientes preguntas: ¿se han resuelto estos problemas en cuanto a su modelamiento? y, si es que se ha llegado a algún tipo de modelo, ¿cuánto queda por avanzar?. La idea de los siguientes párrafos es esbozar una respuesta a estas dos interrogantes. Centrémonos en un solo caso: escurrimientos tipo avalancha.

Primero que nada, entre los principales escurrimientos tipo avalancha tenemos:

- Avalanchas secas, como en el caso del deslizamiento de material rocoso o nieve en una ladera de una montaña.
- Avalanchas compuestas por mezclas de lodo, piedras y agua, como en el caso de aluviones.
- Flujos piroplásticos, que corresponden a una mezcla de material sólido y gases que escurre producto de cierto tipo de erupciones volcánicas.
- Avalanchas dentro de un medio acuoso [2].

En general existen diversos modelos para simular el escurrimiento tipo avalancha, pero es necesario considerar que para casos reales en la naturaleza se presentan diversas complicaciones, como por ejemplo la geometría tridimensional del suelo, que muchas veces posee grandes variaciones de pendiente y forma, lo que también es conocido como efectos topográficos. Por lo general, el problema se aborda planteando las ecuaciones de conservación promediadas en la columna de material granular, considerando diversas aproximaciones y restricciones (de carárter empírico) sobre los esfuerzos basales (en la interfase suelo-partículas) y esfuerzos internos (en la columna de material granular) [3,4].

Otro desafío importante en el caso de las avalanchas es establecer el tamaño y configuración longitudinal de la zona afectada por el arrastre de material. Esto tiene especial relevancia en el caso de avanchas de nieve, donde una falla superior gatilla un repentino desplazamiento de una masa de material. El modelamiento de este escurrimiento se realiza considerando la naturaleza aproximadamente visco-elástica de este medio, lo que sirve para formular un modelo lineal, que involucra una serie de parámetros empíricos representativos de la reología de la nieve [5].

Para resumir las respuestas a las interrogantes planteadas podemos decir por un lado, que sí existen modelos que permiten simular avalanchas pero, por otro, en su formulación intervienen parámetros empíricos específicos para cada caso, por lo que no se puede afirmar que se cuenta con una teoría fenomenológica general para este tipo de escurrimientos.

Ahora, si nos centramos en el área industrial, también se presentan innumerables desafíos en los que los medios granulares son claramente protagonistas. Comenzaremos primero por mencionar algunos escurrimientos vinculados a procesos industriales:

- Escurrimientos en silos, molinos y tolvas.
- Transporte de material particulado en mangas y tornillos sin fin.
- Segregación de material granular en harneros.

Además, no solo los equipos que interaccionan con granos son de importancia para su estudio en la industria, en la minería por ejemplo es vital investigar:

- Los flujos de extracción de material en un medio subterráneo.
- El comportamiento de las laderas del yacimiento para minas a tajo abierto frente al riesgo de deslizamiento de tierras.

- El transporte de relaves.
- El manejo de depósitos de material granular.

Es necesario observar que en los procesos industriales los medios granulares están muchas veces inmersos en sistemas complejos, que involucran otros elementos y fenómenos fuera de la dinámica estrictamente granular. Por ejemplo, el medio granular compuesto por las partículas de combustible (biomasa o carbón) dentro de la cámara de combustión de una caldera de lecho fluidizado. En este caso las partículas son puestas en suspención por medio de aire insuflado desde boquillas ubicadas en el fondo de la cámara de combustión (ver figura 1.1). Los procesos involucrados en este equipo son innumerables, entre otros tenemos [6]:

- Interacción aire partículas.
- Interacción entre partículas.
- Secado y pirólisis de la biomasa.
- Combustión de los gases de pirólisis y del carbono fijo de la biomasa.
- Transferencia de calor interna en el lecho y medio gaseoso.
- Transferencia de calor hacia las paredes de la cámara de combustión

La modelación de este equipo representa un claro ejemplo de lo complicado y desafiante que puede ser simular un caso industrial, donde además tenemos barreras concernientes a la dificultad de adquirir información representativa de las variables del sistema en estado de operación. Sin embargo, existen modelos complejos que consideran todos estos fenómenos de forma simultánea, como el expuesto en *Lathouwers, 2001* [7]. En este modelo se consideran los granos de biomasa de forma discreta, los cuales presentan choques binarios partícula-partícula y arrastre ejercido por el aire insuflado. Es importante señalar que los costos computacionales se elevan para este modelo discreto al considerar una caldera real, en la cual interactúan una cantidad del orden de un millon de partículas, por lo que podría ser ventajoso llegar a plantear una reología asociada a la mezcla aire-combustible para resolver el problema.

Una conclusión general con respecto a la modelación de medios granulares tanto para los problemas que surgen en la naturaleza como para los referidos al ámbito industrial, es que en los casos mencionados existen numerosos desafíos todavía abiertos, ya que si bien muchas veces los modelos superan cada problema mediante el uso de datos empíricos, aun no se posee una comprensión acabada de la reología del medio granular, por lo que los modelos son aplicables a un restringido campo donde son válidas las aproximaciones usadas. Entonces, queda mucho por avanzar.

1.1.2. Clasificación de medios granulares

Los procesos que involucran medios granulares en general presentan algunas características comunes, como lo son:

 La nula participación de la temperatura termodinámica convencional como parámetro relevante.



Figura 1.1: Caldera de lecho fluidizado circulante a carbón (figura extraída de [6])

 La naturaleza eminentemente disipativa de los escurrimientos, debido a la inelastisidad de las colisiones entre granos.

Sin embargo, existe en mucha mayor medida una serie de características diferenciadoras que permiten clasificar los procesos de naturaleza granular.

Una de las principales y más simples clasificaciones de los medios granulares secos, es de acuerdo a su cercanía con respecto a los regímenes sólido, líquido y gaseoso convencionales.

Régimen sólido

El ejemplo de comportamiento granular como sólido por antonomacia es el de una pila de arena. El montículo se puede formar vaciando la arena en una superficie plana, ya que el arreglo formado puede resistir esfuerzos cortantes en el plano horizontal sin deformarse, lo que frena el escurrimiento. Un parámetro característico de las pilas de material granular es el ángulo de roce, que corresponde al ángulo formado entre la superficie de la pila y la horizontal.

En oposición a lo anterior, un fluido no puede resistir esfuerzos cortantes sin deformarse, lo que le impide formar pilas al efectuar la misma experiencia, ya que un fluido escurre hasta transformarse en una fina película, por lo que su ángulo de roce es cero.

Un importante fenómeno que ocurre en los medios granulados en régimen sólido y líquido, es la formación de cadenas de fuerzas. Estas cadenas corresponden trayectos entrelazados o redes donde se concentran los esfuerzos de contacto entre las partículas.

La figura 1.2 muestra dos pilas de partículas bidimensionales (discos y elipses) construídas con material foto-elástico, el cual indica la dirección en que está siendo comprimida cada partícula cuando se ejercen esfuerzos de contacto [8]. En esta figura se aprecia que la forma de las partículas inside en la configuración de las cadenas de esfuerzos, además se puede ver que la pila de las partículas elípticas posee mayor ángulo de roce.



Figura 1.2: Pila 2D de partículas foto-elásticos. a) Partículas circulares, b) partículas de forma elíptica (figura extraída de [8]).



Figura 1.3: Perfiles horizontales de fuerza normal promediados sobre 500 repeticiones para una pila de 3000 partículas de forma de disco (2500 de diametro $6.9 \pm 0.1[mm]$ y 500 de diámetro $8.9 \pm 0.1[mm]$). Los puntos representan datos experimentales a distintas alturas de la pila. Cuadrados: h = 3.5[cm], círculos: h = 7.0[cm], triángulos: h = 10.5[cm] y diamantes: h = 14.0[cm]. Las líneas representan la distribución exponencial de fuerzas normales predecida por el *q-model* (figura extraída de [8]).

Para comprender el comportamiento de las cadenas de fuerzas en pilas de material granular, han sido elaborados diversos modelos, uno de los más conocidos es el *modelo-q* (*q-model*) propuesto por *Liu et al., 1995* [9]. Este modelo, que considera que el medio granular puede ser descrito como un entramado regular de cadenas de fuerzas, logra predecir la distribución exponencial de fuerza normal ejercida en el plano horizontal de la pila, observada en experimentos y simulaciones discretas (ver figura 1.3). Sin embargo, el *modelo-q* falla, por ejemplo, al no predecir la caida de presión en la zona superior del montículo mostrada en figura 1.3 [8], lo que ha sido documentado en *Jotaki & Moriyama, 1979* [10] y en *Brockbank et al., 1997* [11], además de otros estudios más recientes.

Régimen líquido

Los casos más representativos de medios granulares que presentan un comportamiento denominado *líquido*, se pueden clasificar en dos. En el primer caso tenemos flujos confinados entre 2 paredes tales como: escurrimientos en silos, celda tipo Couette y cizalle simple. Por otro lado, tenemos también los flujos de superficie libre, tales como: avalanchas, estanques rotatorios y flujos sobre pilas [13], como se muestra en la figura 1.4.

En este régimen el medio granular fluye siguiendo una reología clasificada como visco-plástica, esto debido principalmente a dos características:

- 1. Existe un umbral de esfuerzo de corte donde no existe flujo.
- 2. Sobre este umbral el medio granular fluye con una reología dependiente de la velocidad de deformación [12].

Otro par de características importantes de este régimen es que se mantiene la red de cadenas de fuerzas presente en el régimen sólido y que las propiedades intensivas del flujo se vuelven menos



Figura 1.4: Ejemplos de configuraciones para las cuales el medio granular es considerado dentro del régimen líquido. Flujos confinados: a) cizalle simple, b) celda tipo Couette y c) silo; flujos con superficie libre: d) avalancha, e) flujo sobre pila y f) tambor rotatorio (figura extraída de [12]).

sensibles a cambios en el coeficiente de restitución, aunque en la transición líquido-gas se recupera esta dependencia [13].

Régimen gaseoso

Cuando un grupo de granos dentro de una caja es fuertemente vibrado, las partículas se agitan e interactúan por medio de colisiones binarias [14]. Además, en este caso los granos se mueven independientemente, salvo cuando ocurre una colisión. Las observaciones anteriores corresponden coincidentemente a preceptos fundamentales de la *Teoría Cinética de los Gases*, lo cual nos lleva a pensar en su aplicabilidad en medios granulares de estas características. Sin embargo, es necesario considerar además la naturaleza inelástica de las choques asociada al coeficiente de restitución, lo que está asociado a una pérdida de energía cinética dada por:

$$\Delta E_c = -\frac{m}{4} (1 - \epsilon^2) \left((\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{k} \right)^2, \tag{1.1}$$

donde *m* y ϵ corresponden a la masa de la partícula y el coeficiente de restitución respectivamente y \vec{v}_1, \vec{v}_2 y \vec{k} , corresponden a las velocidades de cada partícula y el vector unitario denominado *vector colisión* que posee la dirección que va desde la partícula 2 a la 1.

Por último, es importante decir que la *Teoría Cinética de los Gases* logró ser aplicada a cabalidad en medios granulares, luego de la introducción del concepto de temperatura granular [15], la cual se expresa como:

$$T = \frac{m}{3} \left\langle (\delta v)^2 \right\rangle, \tag{1.2}$$

donde $\delta v = v - \langle v \rangle$ corresponde a la fluctuación de la velocidad con respecto al valor medio.

La presente tesis está abocada especificamente al *régimen granular líquido*, para el cual se estudiarán diversos casos a través de la aplicación de modelos numéricos de tipo continuo y discreto.

Por otra parte, el *régimen granular líquido* ya ha sido caracterizado en cuanto a su reología para problemas de tipo estacionario [13], lo que será visto con detalle en el capítulo 2. Sin embargo, este hallazgo es relativamente reciente y existe un amplio especto de problemas por estudiar, lo que constituye la motivación del trabajo de investigación desarrollado en los siguientes capítulos. Específicamente la idea principal es contestar las siguientes preguntas:

- 1. ¿Las leyes reológicas encontradas para el régimen líquido estacionario, son aplicables a otros casos de estudio estacionarios distintos a los que dieron su origen?
- 2. ¿Estas leyes reológicas son aplicables a problemas no estacionarios?

Estas preguntas constituyeron la base para el planteamiento de los objetivos de esta tesis descritos en la siguiente sección.

1.2. Objetivos del presente estudio

A continuación se enumeran de manera sucinta los principales objetivos de la presente tesis.

1.2.1. Objetivos generales

- 1. Aplicar y evaluar modelos continuos formulados para medios granulares densos, considerando casos específicos de estudio.
- 2. Describir el comportamiento de un medio granular cizallado, sometido a drásticos cambios en la velocidad de deformación.

1.2.2. Objetivos específicos

Objetivos específicos asociados al objetivo general 1

- 1. Seleccionar modelos continuos a aplicar de acuerdo a una búsqueda bibliográfica.
- 2. Desarrollar los modelos para casos específicos de estudio.
- 3. Evaluar el desempeño de los modelos.

Objetivos específicos asociados al objetivo general 2

- 1. Describir la evolución temporal de las variables dinámicas y cinemáticas para un medio granular en estado transiente.
- 2. Describir en términos generales el comportamiento reológico del caso de estudio.
- 3. Proponer modelos y/o relaciones para explicar el comportamiento del medio granular.

1.3. Metodología general

La metodología general para el análisis de cada problema presentado en la presente tesis es de carácter numérico y, como se explica a continuación, depende del enfoque considerado para cada problema.

1.3.1. Metodología para problemas estacionarios

Los problemas de medios granulares estacionarios fueron abordados considerando un modelo reológico continuo, el que fue desarrollado usando el método de volúmenes finitos (*Finite Volume Method*). Este método en términos generales, una vez planteadas las ecuaciones de conservación (masa y momentum) y las leyes constitutivas, discretiza el medio granular en N volúmenes, para luego integrar las ecuaciones espacial y temporalmente sobre cada volumen y cada intervalo de tiempo, obteniéndose un sistema de ecuaciones lineales, como se expone con detalle en el capítulo 3 de esta tesis.

Para este caso se selecionaron dos problemas de estudio para los cuales se aplicaron las leyes constitutivas propuestas por *Pouliquen* [12, 13] y su extensión tensorial descrita en *Forterre & Pouliquen, 2006* [16].

Los resultados de los modelos fueron contrastados con experimentos y observaciones extraídas desde fuentes bibliográficas.

1.3.2. Metodología para problema transiente

El análisis reológico para el caso no estacionario fue realizado a través de un modelo discreto y es presentado en el capítulo 4 del presente trabajo. En este capítulo, a través de un protocolo de ensayo, se desarrollaron múltiples simulaciones para el caso de estudio seleccionado. Los resultados promediados de estas simulaciones para cada instante de tiempo, constituyen los datos con que se desarrolló la caracterización fenomenológica del problema.

El modelo discreto ocupado es del tipo denominado *dinámica molecular*, idéntico al planteado por *Luding*, 2006 [17] y fue calibrado usando el caso estacionario caracterizado en el trabajo de *Trulsson et al.*, 2012 [18].

1.3.3. Estructuración del texto de la tesis

La presente tesis fue estructurada estableciendo los 2 primeros capítulos como introductorios a los fundamentos de la teoría de los medios granulares, con el objetivo de establecer una base para el desarrollo de los problemas de los capítulos 3 y 4.

Por otra parte, en los capítulos 3 y 4 se desarrollan en extenso los problemas selecionados para este estudio, siguiendo la metodología establecida en los puntos anteriores.

Finalmente, en el capítulo 5 se resumen las principales conclusiones de esta tesis y además se proponen distintos trabajos a futuro, con el objetivo de orientar los estudios que pretendan avanzar en los puntos desarrollados en el presente trabajo.

Capítulo 2

Modelamiento de medios granulares

2.1. Modelos discretos

La modelación discreta se refiere a los métodos numéricos desarrollados en base a simulaciones partícula a partícula, abarcando un amplio espectro de tamaños para los elementos simulados, que van desde la escala molecular, como en el caso de modelación de gases o líquidos, hasta tamaños del orden de kilómetros, como en el caso de simulación de asteroides. Esta área ha tenido un gran desarrollo de la mano del aumento de la capacidades de los computadores en las últimas dos décadas. Sin embargo, no solo este punto explica su explosivo desarrollo, ya que si nos planteamos la pregunta: ¿porqué son necesarias las simulaciones discretas a la hora de investigar medios granulares?, existen otros argumentos gravitantes referidos al ámbito industrial expuestos en Pöschel & Schwager, 2005 [19], los cuales son principalmente:

- 1. No existe hasta ahora una teoría global que prediga el comportamiento de un medio granular en equipos de carácter tecnológico (silos y molinos por ejemplo).
- 2. Realizar experimentos con equipos industriales resulta costoso económicamente, lento y muchas veces conlleva cierto grado de riesgo hacia las personas.
- 3. La teoría asociada a las simulacionas discreta está bastante consolidada, lo que permite su aplicación de forma generalizada.

Por estos motivos se han fortalecido y popularizado entre la comunidad científica y tecnológica los métodos discretos para la simulación de medios granulares. A continuación se describen los principales.

2.1.1. Dinámica molecular (dinámica de granos blandos)

Modelo

Este método originalmente se desarrolló para modelar la interacción entre moléculas de gases o líquidos. En estos casos existe una fuerza ligeramente atractiva entre dos átomos o moléculas cuando se encuentran a una distancia entre centros mayor a la media de los diámetros, o sea, cuando no hay solapamiento. Por otro lado, a distancias menores a la media de los diámetros, esto es, cuando hay solapamiento, existen grandes fuerzas repulsivas [20]. Para adaptar este modelo a flujos granulares se puede restringir el potencial repulsivo a la zona de solapamiento y hacer nulo el potencial atractivo. Normalmente las partículas son consideradas con 3 grados de libertad en problemas 2D (traslación en 2 ejes, más rotación) y 6 grados en problemas 3D (traslación y rotación en los 3 ejes).

Las fuerzas que intervienen en este modelo adaptado a flujos granulares son:

- 1. Fuerza repulsiva: es proporcional al solapamiento de los granos.
- 2. Fuerza disipativa: es de carácter viscoso, proporcional a la velocidad de impacto relativa.
- 3. Fuerza tangencial: es perpendicular a la dirección de la colisión y está dada por el criterio de Coulomb.

La expresión para el solapamiento χ de dos partículas *i*, *j*, con radios R_i , R_j , separadas una distancia r_{ij} , esta dada por:

$$\chi = R_i + R_j - r_{ij}.\tag{2.1}$$

Con esto, la fuerza normal F_i^n en la dirección del choque sobre la partícula *i*, en su interacción con la partícula *j* es:

$$F_i^n = \kappa \chi + \eta \dot{\chi}, \tag{2.2}$$

donde, κ y η son coeficientes de proporcionalidad. Un punto importante a resaltar, es que el valor de κ determina la rigidez o deformabilidad de las partículas, sin embargo los sistemas se pueden considerar independientes de κ , cuando este valor es lo suficientemente grande en relación con la presión a la cual está sometido el medio granular, clasificándose el sistema dentro del *Régimen Asintótico de Comportamiento Rígido*.

Al resolver la ecuación de movimiento en la dirección normal a la superficie de contacto, podemos encontrar las siguientes expresiones para el tiempo de interacción t_{int} y el coeficiente de restitución $\epsilon = -\frac{v_f}{v_i}$:

$$t_{\rm int} = \pi \left\{ \frac{\kappa}{m_{\rm eff}} - \left(\frac{\eta}{2m_{\rm eff}}\right)^2 \right\}^{-1/2}$$
(2.3)

$$\epsilon = \exp\left\{-\frac{\eta t_{\text{int}}}{2m_{\text{eff}}}\right\}.$$
(2.4)

En las dos expresiones anteriores $m_{\text{eff}} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ es la masa efectiva de los granos en colisión. Otro modelo para la parte elástica de F_i^n es el derivado por *Hertz*, 1882 [21]:

$$F_{i(e)}^{n} = \frac{2\kappa \sqrt{R_{\text{eff}}}}{3(1-\nu^{2})} \chi^{3/2},$$
(2.5)

siendo ν el coeficiente de Poisson y $R_{\text{eff}} = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j}$ el radio efectivo de las esferas en colisión.

Por otra parte, es necesario considerar además la fuerza tangencial al eje de contacto que está dada por el roce de Coulomb [22]. Esta fuerza va desde cero, si es que no existe deslizamiento, hasta un máximo dado por la expresión:

$$F^{t} = -\mu \mid F^{n} \mid sign(v_{t}), \tag{2.6}$$

con v_t igual a la velocidad relativa de las superficies de contacto y μ el coeficiente de roce de Coulomb.

Para completar este modelo discreto se puede agregar una expresion análoga a la ecuación 2.2 para la dirección tangencial.

Procedimiento numérico

La clave de este método consiste en calcular la posición de las partículas en el instante t^n , a partir de la ecuación de Newton, usando las fuerzas calculadas para el instante anterior t^{n-1} . Las nuevas posiciones implican un determinado solapamiento con el que se calculan las fuerzas para el siguiente instante t^n , las que permiten ahora encontrar las posiciones para t^{n+1} , repitiéndose sucesivamente este proceso. Esta aproximación implica que el intervalo de tiempo para el cálculo numérico Δt , debe ser bastante inferior al tiempo en que las partículas permanecenen contacto t_{int} , definido anteriormente, para así asegurar que los solapamientos no se sobredimensionen, lo cual generaría fuerzas de repulsión mucho mayores a las reales. En *Pöschel & Schwager, 2005* [19] se señala el siguiente ciclo iterativo para un código estandar:

- 1. *Inicialización:* Las coordenadas y velocidades de las partículas del sistema son leidas desde un archivo de partida para el tiempo inicial t^0 .
- 2. *Predictor:* Se calculan las nuevas coordenadas para el instante $t^0 + \Delta t$ de acuerdo a las ecuaciones de la cinemática.
- 3. Fuerzas:
 - *a*) Se identifican los pares de interacción. En este paso se puede aumentar la eficiencia del proceso a través de métodos como el de *listas de vecinos*.
 - b) Cálculo de las fuerzas entre cada par de partículas que están interactuando.
- 4. *Corrector:* Se corrigen las coordenadas y velocidades obtenidas en 2 usando las fuerzas de 3 para determinar las aceleraciones.
- 5. *Extracción de datos:* Se almacenan los datos de posiciones y velocidades, más los que se estimen necesarios.
- 6. *Fin del programa:* Se termina el programa llegado un determinado evento, en otro caso se vuelve al punto 2.

El costo computacional de este método es de $O(N^2)$, con N igual el número de granos, pero se puede bajar a O(N), trabajando con listas de vecinos [31].



Figura 2.1: Esquema de velocidades para choque sin solapamiento entre dos partículas. En la figura \vec{v}_i^0 y \vec{v}_i representan las velocidades antes de la colisión y después de esta para la partícula *i* (la misma nomenclatura se repite la la partícula *j*), mientras que vector unitario \hat{n} va desde el centro de la partícula *i* hasta el centro de la partícula *j*.

2.1.2. Dinámica molecular de granos duros o dirigida por eventos

Según *Pöschel & Schwager*, 2005 [19] y *Rapaport*, 2004 [20], la diferencia fundamental entre el método de dinámica molecular de partículas blandas con el de partículas duras, está en que para este último no existe solapamiento alguno, lo que conlleva que para conocer la cinemática de las partículas no se calculan las fuerzas de contacto, sino que se fija una regla de colisión para el intercambio de momentum lineal y angular.

La metodología de cálculo es sencilla y se puede resumir como:

- Se comienza con una configuración inicial conocida, para luego calcular a partir de las velocidades y trayectorias balísticas (lo que puede considerar gravedad), los eventos de choque inmediatos. En otras palabras, se calculan las velocidades después de cada choque, a partir de las velocidades antes del choque.
- Se ejecuta uno o varios choques y se repite el proceso del punto anterior.
- Pueden crearse modelos de choque elásticos o parcialmente elásticos, asociados a un coeficiente de restitución de momentun lineal y angular.
- Pueden considerar condiciones de estancamiento para mantener a partículas en contacto permanente, como en el trabajo de *González*, 2009 [24] y Parra & Soto, 2013 [25].

La regla de colisión más sencilla consiste en considerar que la disipación de momentum en un choque ocurre solo en la direción \hat{n} paralela a la colisión (ver figura 2.1). Si descomponemos la velocidad de una partícula en los ejes perpendicular y paralelo al vector \hat{n} como $\vec{v} = (u, v)$, es posible obtener las velocidades en la dirección de la colisión v_i y v_j , en el instante después del choque de dos partículas *i* y *j*, a través de:

$$v_i = v_i^0 - \frac{1+\epsilon}{2} v_n \tag{2.7}$$

$$v_j = v_j^0 + \frac{1+\epsilon}{2} v_n,$$
 (2.8)

donde v_i^0 y v_j^0 corresponden a las componentes de las velocidades en la dirección del choque antes de la colisión, v_n es la velocidad relativa de las partículas en la dirección del choque y ϵ es el coeficiente de restitución.

Este método es sumamente eficiente para bajas densidades volumétricas del medio granular, por el contrario, para altas densidades se eleva fuertemente el número de choques, por lo que se vuelve muy costoso computacionalmente. Sin embargo, en el estudio desarrollado por *González, 2009* [24], se logó simular flujos densos aplicando condiciones de estancamiento de los granos, con lo que se disminuye drásticamente el número de choques a calcular.

2.1.3. Dinámica de contacto

Esta metodología se basa en el cálculo de las fuerzas de contacto entre granos y fue desarrollada por *Jean & Moreau*, *1992* [26], para resolver problemas presentes en sistemas mecánicos sometidos a restricciones de impenetrabilidad. Sin embargo, ha sido muy utilizada para simulación de flujos granulares, por ejemplo, en los trabajos realizados por *Staron & Hinch, 2002* [27] y *Unger & Kertész, 2002* [28].

Las aproximaciones fundamentales de la dinámica de contactos corresponden a:

- Los granos son completamente rígidos por lo cual no existe solapamiento.
- En un contacto no hay deslizamiento perpendicular a la línea de choque, a menos que la fuerza tangencial a las superficies en contacto, sea mayor a la dada por el roce estático de Coulomb.

El algoritmo para este caso consiste en calcular las velocidades y fuerzas después de las colisiones ocurridas transcurrido un intervalo de tiempo Δt , utilizando datos obtenidos antes de la colisión, para resolver la ecuación de momentum, la condición de roce estático y las leyes de impenetrabilidad.

El costo computacional para este método es de orden O(NM), con M igual al número de intervalos de tiempo, sin embargo, el número de intervalos de tiempo es mucho menor que en la dinámica molecular de granos blandos.

2.2. Modelos continuos

Los modelos continuos se basan en la hipótesis de continuidad del medio granular, lo que permite aplicar las leyes de conservación en su forma diferencial para masa y momentum dentro del dominio. El problema se cierra considerando leyes constitutivas asociadas a la naturaleza del medio, que relacionan el tensor de esfuerzos con variables cinemáticas del problema.

2.2.1. Modelo visco-plástico

El principal modelo viscoplástico para medios granulares con comportamiento fluido, corresponde al modelo desarrollado principalmente por *Pouliquen, 2004* [13]. Este modelo se formula a través del análisis dimensional para el caso de corte simple 2D mostrado en la figura 2.2. Para este sistema, si el módulo de Young *E* de los granos es mucho mayor que la presión de confinamiento *p*,



Figura 2.2: Celda de corte simple para un medio granular. Los círculos sin relleno representan paredes, mientras los con relleno se pueden mover libremente. La pared inferior se mantiene fija, mientras que a la pared superior se le impone una velocidad horizantal V y además una presión externa p.

las partículas pueden considerarse rígidas, lo que restringe el número de parámetros del problema a solo 4 [14]

- 1. Diámetro de las partículas d.
- 2. Densidad de las partículas ρ .
- 3. Velocidad de deformación $\dot{\gamma} = \frac{V}{H}$.
- 4. Presión vertical de confinamiento p.

Estos parámetros involucran 3 magnitudes fundamentales que son masa, longitud y tiempo. Aplicando el teorema Π se tiene que existe solo una variable adimensional que controla el problema, la que puede expresarse como:

$$I = \frac{d\dot{\gamma}}{\sqrt{\frac{p}{\rho}}}.$$
(2.9)

Este número denominado *número de inercia* representa la razón entre dos tiempos característicos [30]:

$$I = \frac{t_{\rm micro}}{t_{\rm macro}} \,. \tag{2.10}$$

El tiempo a escala micro t_{micro} representa el tiempo que tardan los granos en reacomodarse a escala de partícula. Concretamente se puede interpretar como el tiempo que tardan en meterse en un agujero de tamaño $d \times d \times d$ al estar sometidos a una presión *p*. La figura 2.3 muestra un esquema del reposionamiento de un grano a escala de tiempo t_{micro} .

La partícula de la figura 2.3 presenta el siguiente balance de fuerzas:

$$pA = ma$$
,

donde A y m representan el área transversal y la masa de la partícula. De este modo:

$$p\frac{\pi d^2}{4} = \rho \frac{\pi d^3}{6} \frac{d}{t^2},$$



Figura 2.3: Reposicionamiento de una partícula dentro de un agujero del medio granular.

con lo cual se obtiene:

$$t_{\rm micro} \propto \frac{d}{\sqrt{\frac{p}{
ho}}}$$
 (2.11)

Por otro lado, el tiempo t_{macro} está relacionado con el escurrimiento global a través de:

$$t_{\rm macro} = \frac{1}{\dot{\gamma}}$$

Del análisis dimensional se tiene que los demás números adimensionales formados a partir de las variables medidas del problema, deben ser controlados por *I* [14]. De esta forma el coeficiente de roce efectivo $\mu = \frac{\tau}{p}$ (donde τ representa el esfuerzo de corte medido) y la fracción volumétrica medida ϕ se pueden expresar como:

$$\mu = \mu(I) \tag{2.12}$$

$$\phi = \phi(I). \tag{2.13}$$

Esta dependencia fue confirmada a través de simulaciones discretas y datos experimentales en los trabajos de *GDR MiDi*, 2004 [13] y *Pouliquen et al.*, 2006 [29], obteniéndose expresiones de la forma:

$$\mu(I) = \mu_1 - \frac{\mu_1 - \mu_2}{\frac{I_0}{I} + 1}$$
(2.14)

$$\phi(I) = \phi_c - mI. \tag{2.15}$$

Las relaciones anteriores fueron obtenidas para 6 tipos de flujos, todos estacionarios, 3 confinados y 3 no confinados, los que corresponden a los mismos casos mostrados en la figura 1.4 del capítulo anterior. Los parámetros: μ_1 , μ_2 y I_0 para $\mu(I)$ son propiedades del material al igual que ϕ_c y *m* en $\phi(I)$. La figura 2.4 muestra de forma esquemática estas relaciones.

Una observación importante sobre la figura 2.4.a es que para I = 0 se indetermina el valor de μ , dado que la curva $\mu = \mu(I)$ se vuelve vertical, de forma análoga con lo que sucede con el coeficiente de roce estático para dos superficies. Por otro lado, dentro de esta misma figura se aprecia que si Itiende a cero por la derecha, el coeficiente de fricción toma el valor característico $\mu = \mu_1$, mientras que si I es lo sufientemente grande, el coeficiente de fricción toma el valor característico $\mu = \mu_2$.

A su vez, a partir de la expresión $\phi = \phi(I)$ y de la definición del número de inercia, se puede encontrar la siguiente expresión para la presión de confinamiento:



Figura 2.4: Esquema representativo de las curvas encontradas al graficar las expresiones 2.12 y 2.13 a partir de datos experimentales y simulaciones discretas. a) Curva $\mu = \mu(I)$, b) curva $\phi = \phi(I)$.

$$p = \frac{m^2 \rho d^2 \dot{\gamma}^2}{(\phi_c - \phi)^2}.$$
 (2.16)

El modelo de *Pouliquen* también admite una formulación tensorial dada por *Forterre & Pouliquen*, 2008 [12]:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \tag{2.17}$$

$$\tau_{ij} = \eta \dot{\gamma}_{ij} \tag{2.18}$$

$$\eta = \frac{\mu(I)p}{\|\dot{\gamma}\|} \tag{2.19}$$

$$\|\dot{\gamma}\| = \sqrt{\frac{1}{2}} \dot{\gamma}_{ij} \dot{\gamma}_{ij}. \qquad (2.20)$$

Esta formulación tensorial se obtiene al suponer que los tensores de esfuerzo y velocidad de deformación son paralelos. Esta hipótesis no siempre es válida, como se muestra en el trabajo de *Cortet et al., 2009* [32], donde mediante simulaciones discretas se estudia la reología de un medio granular denso dentro de un tambor rotatorio, obteniéndose que las componentes de los tensores no satisfasen la relación $\tau_{ij} = \eta \dot{\gamma}_{ij}$, aunque sí se cumple de forma aproximada la relación entre los módulos de los tensores: $|\tau| = \eta |\dot{\gamma}|$.

Existen otras limitaciones de la reología $\mu = \mu(I)$ de *Pouliquen*, que son:

- 1. No considera el fenómeno de histéresis.
- 2. Este modelo es local y existen fenómenos no locales donde la reología de un punto depende de su entorno.

Lo anterior se ve reflejado en la figura 2.5, donde para el caso a se aprecia el fenómeno de histéresis para un escurrimiento concéntrico. Aquí los valores del coeficiente de fricción en la pared interior son diferentes cuando la velocidad de deformación crece, comparados con los mismos casos pero con velocidad de deformación decreciente. Para los casos b y c, se aprecia que es determinante la geometría del experimento en el ángulo de inicio o detención del escurrimiento, lo cual debiera estar asociado a alguna variable no local que influye sobre la reología de la superficie libre del medio [12].



Figura 2.5: a) Histéresis para un flujo concéntrico. El eje y corresponde al coeficiente de fricción para la pared interna y el eje x a la velocidad de deformación adimensional. Los círculos abiertos representan el sentido donde $\dot{\gamma}$ es creciente, mientras que los círculos rellenos representan el proceso donde $\dot{\gamma}$ es decreciente. Las figuras b) y c) dan cuenta del fenómeno de no localidad al existir una dependencia geométrica de las curvas. Círculos abiertos θ_{start} y círculos rellenos θ_{stop} (figura extraída de *Forterre*, 2008 [12]).

2.2.2. Modelos de dos fases

Para ejemplificar este tipo de modelos nos referiremos principalmente al trabajo de *Aranson et al., 2008* [33]. Este modelo asume que los esfuerzos en el dominio de un escurimiento granular son producidos por dos formas de interacción entre los granos, cuyos efectos se pueden separar. Estas interacciones son:

- 1. Contacto cuasi-estático asociado a un tensor de esfuerzo σ^s (referido al estado sólido).
- 2. Colisiones y roce deslizante asociado a un tensor de esfuerzo σ^{f} (referido al estado líquido o fluido).

La suma de estos dos tensores determina entonces el esfuerzo total:

$$\sigma = \sigma^s + \sigma^f \,. \tag{2.21}$$

Otra de las ideas fundamentales de estos modelos, es que la importancia de cada uno de estos dos efectos está controlada por un parámetro de estado ρ ($\rho \rightarrow 1$ en sistemas cercanos al estado sólido y $\rho \rightarrow 0$ para sistemas fluidos), de este modo:

$$\sigma_{xy}^s = [1 - q(\rho)]\sigma_{xy} \tag{2.22}$$

$$\sigma_{xy}^f = q(\rho)\sigma_{xy}, \qquad (2.23)$$

siendo $q(\rho)$ una función empírica denominada *función de separación*. En el trabajo de *Volfson et al.*, 2003 [34] se propone una relación empírica para $q(\rho)$ de la forma:

$$q(\rho) = (1 - \rho)^{2.5}.$$
 (2.24)

Donde ρ se obtiene de una ecuación de transporte del mismo tipo que la ecuación de relajación de Ginzburg-Landau, de la forma:

$$t_0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \rho\right) = l_0^2 \nabla^2 \rho - \frac{\partial F(\rho, \delta)}{\partial \rho}.$$
 (2.25)

En la ecuación 2.25 los términos t_0 y l_0 corresponden respectivamente al tiempo característico del problema y a la escala de longitud, considerada por lo general como el diámetro de los granos, en tanto $F(\rho, \delta)$ representa una función de la energía libre. En *Volfson et al., 2003* [34] se propone la relación para $F(\rho, \delta)$:

$$F(\rho,\delta) = (1-\rho) \left(\rho^2 - 2\rho_* \rho + \rho_*^2 e^{-A(\delta^2 - \delta_*^2)} \right),$$
(2.26)

 $con \rho_*, \delta_*$ y A parámetros de ajuste.

Dividiendo la ecuación 2.21 por la presión, se obtiene que el coeficiente efectivo μ_{eff} es la suma entre el coeficiente sólido y el fluido (*Aranson et al., 2008* [33]):

$$\mu_{\rm eff} = \mu^s + \mu^f \,,$$

lo que también se expresa como:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{\sigma_{xy}^s}{p} + \frac{\sigma_{xy}^f}{p}.$$
(2.27)

A través de simulaciones discretas, el mismo autor encuentra expresiones para μ^f dependientes del valor de $\dot{\gamma}$:

1. Para valores intermedios y altos de $\dot{\gamma}$:

$$\frac{\mu^{J}}{I} = \mu_{0}. \tag{2.28}$$

2. Para valores de $\dot{\gamma}$ bajos:

$$\frac{\mu^f}{I} = \left(\frac{\alpha}{S} - \mu_0\right) e^{-\beta I/S} . \tag{2.29}$$

donde: $I = \frac{\dot{\gamma}}{\sqrt{p}}$, $\alpha \approx 1.05$ y $S = \sqrt{p\xi}$, (ξ es el inverso del módulo de elasticidad del material de las partículas) y $\beta = 2.25$.

El coeficiente μ^s se calcula como la resta entre μ_{eff} y μ^f con $\dot{\gamma} \rightarrow 0$, con lo que obtenemos:

$$\mu^s = \mu_{\rm eff} - \frac{\alpha I}{S} \,. \tag{2.30}$$

Por último, es importante mencionar que este modelo logra captar fenómenos no locales del escurrimiento al comparar con datos obtenidos de un modelo discreto para el caso de la descarga de una tolva [33].



Figura 2.6: Perfiles de velocidad para problemas con gradientes pronunciados de velocidad de deformación. Líneas: valores observados experimentalmente y con simulaciones discretas, puntos: predicción de acuerdo a reología local [36].

2.2.3. Modelos no locales

La reología local correspondiente al modelo propuesto por *Pouliquen* descrita anteriormente, está bastante validada para casos de flujo uniforme, por ejemplo en corte simple ($\dot{\gamma} = cte$), pero, como muestra la figura 2.6, existen importantes diferencias con problemas no uniformes con gradientes altos de velocidad de deformación [35]. En estos casos la ley local predice la no existencia de flujo en zonas donde $\mu < \mu_1$, sin embargo existe un flujo leve en estas zonas que decae con el tamaño de las partículas y que es captado por modelos del tipo no local [36].

A continuación se abordarán un par de modelos no locales que toman como base la reología de *Pouliquen*, la que se corrige sumando un operador diferencial de segundo orden (parte no local) a una variable local.

Modelo de fluidez granular no local

El Modelo de Fluidez Granular No Local (Nonlocal Granular Fluidity Model) desarrollado en [35,36], es una extensión del modelo de fluidez no local originalmente desarrollado para emulsiones [37] y se basa en la definición de la fluidez $f = \frac{\dot{\gamma}}{\tau}$ como el inverso de la viscosidad, que para el caso granular sufre una modificación, definiendose la fluidez g como:

$$g = \frac{\dot{\gamma}}{\mu}.$$
 (2.31)

Esta nueva variable debe satisfacer una ecuación corregida por el efecto no local:



Figura 2.7: Reómetro con medio granular cizallado indirectamente. a) Esquema del reómetro, b) perfil de esfuerzo de cizalle y presión [38].

$$g = g_{\rm loc} + \xi^2 \nabla^2 g \tag{2.32}$$

$$g_{\rm loc} = \frac{\dot{\gamma}_{\rm loc}(\mu, p)}{\mu}, \qquad (2.33)$$

donde ξ se denomina *largo cooperativo plástico* y se define como:

$$\xi = \frac{A}{\sqrt{|\mu - \mu_1|}}d, \qquad (2.34)$$

siendo A el único parámetro de ajuste del modelo.

Este modelo se ajusta de forma bastante precisa a los campos de velocidad de la figura 2.6 [36]. Además, predice de forma aceptable otro fenómeno asociado a una dinámica no local, dado por la dependencia que existe entre el ángulo al cual una avalancha granular se detiene (θ_{stop}) y la profundidad total del medio granular (dependencia geométrica), lo que en [35] se asocia al movimiento cooperativo de las partículas.

Modelo no local basado en el número de inercia

Otro modelo que aborda la no localidad de la reología granular en determinados casos, es el desarrollado en *Bouzid et al., 2013* [38]. En este estudio se utiliza una configuración singular, que consiste en un medio granular insensible a la gravedad (bulk), sometido a cizalle a través de dos capas de granos sensibles a la gravedad y antigravedad respectivamente (zonas buffer), como muestra la figura 2.7.a. A su vez, las zonas buffer están siendo cizalladas por medio de paredes rígidas, lo que les otorga un movimiento horizontal. El efecto de esta configuración es que es posible subir la presión para un esfuerzo de corte dado, lo que permite trabajar en un régimen fluido para un coeficiente efectivo de fricción $\mu < \mu_1$ (ver figura 2.7.b).

El sistema anterior en las cercanías de $\mu = \mu_1$ (tanto por la derecha como por la izquierda), se puede caracterizar a través de una reología no local de la forma [38]:

$$\mu = \mu(I)(1 - \chi(\kappa)), \qquad (2.35)$$

donde $\kappa = \frac{\nabla^2 I}{I} d^2$. En particular si la función χ es considerada lineal, κ pasa a ser una corrección de segundo orden para μ y podemos escribir:

$$\mu = \mu(I) \left(1 - \nu \frac{\nabla^2 I}{I} d^2 \right), \qquad (2.36)$$

con v constante.

El presente capítulo y su antecesor constituyen la base teórica para abordar el tema de esta tesis. En los dos capítulos siguientes se describirá el trabajo de tesis propiamente tal.

En el capítulo 3 se abordará el problema granular desde el punto de vista contínuo y se resolverán numéricamente problemas estacionarios. El objetivo principal es resolver cada caso de estudio planteando las ecuaciones de conservación y considerando leyes constitutivas para cerrar problema. Luego, se compararán los resultados con datos arrojados por experimentos o simulaciones discretas obtenidos desde fuentes bibliográficas.

Por otro lado, el capítulo 4 está avocado al estudio de medios granulares en estado transiente. Concretamente se estudia el caso de corte simple sometido a un cambio brusco en el sentido de la velocidad de deformación. Esta parte del trabajo se basa en el análisis de los resultados de simulaciones de dinámica molecular, las que fueron realizadas para distintos casos, variando el espacio de confinamiento y el tamaño del medio. La principal meta es confrontar las leyes constitutivas existentes, que han sido hechas fundamentalmente para casos estacionarios, con un problema marcadamente no estacionario y así evaluar sus desempeños.
Capítulo 3

Simulaciones continuas de flujos granulares densos

El objetivo de este capítulo es evaluar el desempeño de modelos continuos de dinámica granular para casos específicos de estudio. Los modelos serán resueltos numéricamente mediante el método de volúmenes finitos. Posteriormente, se compararán los resultados de los modelos con datos arrojados por experimentos o simulaciones discretas, obtenidos desde fuentes bibliográficas.

3.1. Flujo en celda tipo Couette modificada

3.1.1. Descripción del problema

La celda Couette modificada corresponde a un cilindro abierto en su parte superior, que presenta al centro de su parte inferior, un disco giratorio de radio R_d (ver figura 3.1). Dentro del cilindro se introduce un medio granular de altura H.

En este sistema se tiene que si las velocidades de rotación del disco son lo suficientemente bajas, la densidad del medio granular se mantiene casi sin variaciones y la superficie libre conserva su forma plana, por lo que el medio granular se puede modelar como incompresible y con dominio cilíndrico [39,40].

El medio granular recibe energía cinética de rotación desde el disco inferior, generándose a



Figura 3.1: Celda Couette modificada (figura extraída de [39]).



Figura 3.2: Regímenes de flujo para celda Couette modificada dependientes del parámetro H/R_d (figura extraída de [39]).

grandes rasgos tres zonas en el medio granular: 1) una zona que gira solidaria al cilindro, 2) otra zona que se mantiene estática limitada por las paredes de la celda y 3) una banda de cizalle de transición entre las zonas 1 y 2.

3.1.2. Regímenes de flujo

Jop, 2008 [39] resume los resultados encontrados en [40, 41], donde a través de experimentos y simulaciones numéricas discretas, se caracterizan tres regímenes para la cinemática del medio granular dentro de la celda Couette modificada (ver figura 3.2). La pertenencia del sistema a uno u otro régimen queda determinada por el valor del parámetro H/R_d , de la forma:

- 1. Sistema abierto: en este régimen una zona circular de la superficie, de tamaño algo inferior al disco rotatorio, gira con la misma velocidad de rotación del disco, generándose un bloque central solidario al disco de forma aproximadamente cilíndrica y una banda de cizalle vertical. Este régimen ocurre para $H/R_d < 0.7$.
- 2. Sistema cerrado: En este régimen la superficie del medio granular no gira, manteniéndose solidaria al disco solo una zona con forma de cúpula, lo que da origen una banda de cizalle con esta misma forma. Este régimen ocurre para $H/R_d > 0.7$.
- 3. Transición: Corresponde a un régimen de comportamiento intermedio entre los dos casos anteriores, donde una parte central de la superficie gira, pero con velocidad menor a la del disco inferior. Este régimen ocurre para $H/R_d \sim 0.7$ [39], aunque los resultados mostrados en [40] muestran que este rango en bastante extenso, abarcando por lo menos el intervalo para H/R_d entre los valores 0.63 y 0.78.

3.1.3. Modelo continuo local

Reología local 3D

El presente modelo asume que el tensor de esfuerzo $\overline{\overline{\tau}}$ sigue la dirección del tensor velocidad de deformación $\overline{\overline{\gamma}}$ [16], con lo cual podemos escribir:

$$\bar{\bar{\tau}} = \frac{\mu(I)p}{|\dot{\gamma}|}\bar{\dot{\gamma}}$$
(3.1)

$$= \eta \bar{\dot{\gamma}}, \qquad (3.2)$$

donde $\eta = \mu(I)p/|\dot{\gamma}|$ representa la viscosidad del medio granular.

Incorporando la expresión $\mu = \mu(I)$ de la reología local, η puede expresarse como:

$$\eta = \left\{ \frac{\mu_1 I_0 + \mu_2 |I|}{(I_0 + |I|)|I|} \right\} d\sqrt{p\rho_g} \,. \tag{3.3}$$

Es importante notar que la viscosidad se indetermina para I = 0, lo que es relevante ya que en el problema de la celda Couette modificada, una parte del medio granular se matiene sin movimiento, lo que implica que la viscosidad en esta zona tiende a infinito.

Ecuación de momentum

Introduciendo el término $\overline{\overline{\tau}} = \eta \overline{\overline{\dot{\gamma}}}$ en la ecuación general de momentum tenemos:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} - \nabla p + \rho \vec{g}$$
(3.4)

$$= \nabla \cdot \left\{ \eta \bar{\gamma} \right\} - \nabla p + \rho \vec{g} \tag{3.5}$$

$$= \eta \nabla \cdot \overline{\dot{\gamma}} + \overline{\dot{\gamma}} \nabla \eta - \nabla p + \rho \vec{g}$$
(3.6)

$$= \eta \nabla^2 \vec{u} + \bar{\gamma} \nabla \eta - \nabla p + \rho \vec{g}.$$
(3.7)

En coordenadas cilíndricas el campo de velocidad del medio granular se escribe como $\vec{u} = u\hat{r} + v\hat{\theta} + w\hat{z}$, con lo que la ecuación de momentum en el eje $\hat{\theta}$ es:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \eta \nabla^2 v + \left(\bar{\bar{\gamma}} \nabla \eta \right)_{\theta}.$$
(3.8)

Es importante notar que la única velocidad distinta de cero para este problema es la velocidad tangencial *v*, la cual debe satisfacer la ecuación anterior.

Por otro lado, las ecuaciones de momentum en los ejes \hat{r} y \hat{z} entregan las siguientes expresiones:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \tag{3.9}$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \rho \frac{v^2}{r}.$$
(3.10)

A partir de la integración de estas ecuaciones es posible obtener la presión del sistema a partir de:

$$p(r_0, z_0) = \rho \left((H - z_0)g + \int_0^{r_0} \frac{v^2}{r} dr \right).$$
(3.11)

En coordenadas cilíndricas el laplaciano para la velocidad tangencial se expresa como:

$$\nabla^2 v = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \,. \tag{3.12}$$

Por otro lado, para este caso tenemos que el tensor velocidad de deformación, el módulo del tensor velocidad de deformación y el gradiente de la viscosidad se escriben como:

$$\bar{\bar{\dot{\gamma}}} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} & 0\\ \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z}\\ 0 & \frac{\partial v}{\partial z} & 0 \end{bmatrix}$$
(3.13)

$$|\dot{\gamma}| = \dot{\gamma} = \sqrt{\left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2}$$
(3.14)

$$\nabla \eta = \begin{bmatrix} \frac{\partial \eta}{\partial r} \\ 0 \\ \frac{\partial \eta}{\partial z} \end{bmatrix}.$$
(3.15)

De este modo:

$$\left(\bar{\dot{\gamma}}\nabla\eta\right)_{\theta} = \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}\right)\frac{\partial\eta}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z}\frac{\partial\eta}{\partial z}.$$
(3.16)

Regla de la cadena aplicada a la viscosidad

Para obtener los gradientes de la viscosidad η , se aplicó la regla de la cadena considerando la dependencia espacial y temporal de cada variable. El objetivo de este procedimiento es obtener por diferenciación algunas derivadas dobles de la velocidad, ya que estos términos presentan soluciones bastante estables. La figura 3.3 muestra un esquema de las distintas variables asociadas a la viscosidad.



Figura 3.3: Arbol de dependencia de η .

Aplicando la regla de la cadena tenemos que las derivadas de la viscosidad corresponden a:

$$\frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial r} \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial r} \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial r} \left(\frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial p} + \frac{\partial \eta}{\partial p} \right)$$
(3.17)

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial c} \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial z}} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial p}{\partial z} \left(\frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial p} + \frac{\partial \eta}{\partial p} \right).$$
(3.18)

Considerando que la derivada del módulo de la velocidad de deformación con respecto al radio se puede expresar como: $\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial r} = \frac{1}{2\dot{\gamma}} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{v}{r} \right)^2 \right]$, es posible llegar a la siguiente expresión para la derivada radial de la velocidad:

$$\frac{\partial \eta}{\partial r} = \alpha_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \alpha_2 \frac{\partial v}{\partial r} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \alpha_4 \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \alpha_5.$$
(3.19)

A su vez, la derivada de la viscosidad con respecto a la coordenada z la escribiremos como:

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = \alpha_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \alpha_2 \frac{\partial v}{\partial z} + \alpha_4 \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \alpha_6.$$
(3.20)

Para estas dos últimas ecuaciones $\alpha_1, ..., \alpha_6$ son definidos a partir de las ecuaciones 3.17 y 3.18 como:

$$\alpha_1 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial r}}$$
(3.21)

$$\alpha_2 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial v}$$
(3.22)

$$\alpha_3 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{1}{2\dot{\gamma}}$$
(3.23)

$$\alpha_4 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial z}$$
(3.24)

$$\alpha_5 = \frac{\partial p}{\partial r} \left(\frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial p} + \frac{\partial \eta}{\partial p} \right).$$
(3.25)

Reemplazando las derivadas espaciales de la viscosidad de las ecuaciones 3.19 y 3.20 en la ecuación 3.16 obtenemos:

$$\left(\bar{\dot{\gamma}} \nabla \eta \right)_{\theta} = \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) \left(\alpha_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \alpha_2 \frac{\partial v}{\partial r} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \alpha_4 \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \alpha_5 \right) + \frac{\partial v}{\partial z} \left(\alpha_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \alpha_2 \frac{\partial v}{\partial z} + \alpha_4 \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \alpha_6 \right).$$
 (3.26)

Considerando que $\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} = r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right)$, podemos escribir:

$$\left(\bar{\dot{\gamma}}\nabla\eta\right)_{\theta} = \beta_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \beta_2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r}\right) + \beta_3 \frac{\partial^2 v}{\partial r \partial z} + \beta_4 \frac{\partial v}{\partial z} + \beta_5 \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}, \qquad (3.27)$$

donde los coeficientes β_1, \dots, β_5 están definidos consistentemente con la ecuación 3.26 como:

$$\beta_1 = \alpha_1 r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) \tag{3.28}$$

$$\beta_2 = r \left(\alpha_3 \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \alpha_5 \right)$$
(3.29)

$$\beta_3 = \alpha_4 \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$
(3.30)

$$\beta_4 = \alpha_2 \frac{\partial v}{\partial z} + \alpha_6 \tag{3.31}$$

$$\beta_5 = \alpha_4 \frac{\partial v}{\partial z}. \tag{3.32}$$

Al desarrollar las derivadas espaciales de la viscosidad de acuerdo a la regla de la cadena, aparece el término $\partial \eta / \partial I$ en las ecuaciones 3.17 y 3.18, el cual es proporcional a $1/I^2$. Esto implica que en la zona donde el medio granular está en reposo los gradientes de la viscosidad se indeterminan, lo que se solucionó multiplicando la ecuación de momentum en $\hat{\theta}$ por $1/\eta^2$. De este modo, la expresión final para esta ecuación fue:

$$\frac{\rho}{\eta^2}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\eta r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left\{r^2\frac{\partial u}{\partial r} - ru\right\} + \frac{1}{\eta}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{\eta^2}\left\{\beta_1\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \beta_2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v}{r}\right) + \beta_3\frac{\partial^2 v}{\partial r\partial z} + \beta_4\frac{\partial v}{\partial z} + \beta_5\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right\}.$$
 (3.33)

3.1.4. Resolución numérica mediante volúmenes finitos

La metodología asociada a la resolución numérica de una ecuación diferencial por medio de volúmenes finitos, consiste en la integración espacial de la ecuación diferencial para cada elemento de volumen ΔV , asociado a una malla del sistema. Al mismo tiempo se integra esta ecuación temporalmente a lo largo de un intervalo Δt . Esta doble integración representa fisicamente un balance de los términos de la ecuación diferencial asociado al volúmen ΔV , durante el periodo de tiempo Δt .

Es recomendable mantener la parte transiente de una ecuación diferencial resuelta por volúmenes finitos, a pesar de estar resolviendo un problema estacionario, ya que esto permite acercarse paulatinamente a la solución estacionaria, lo que otorga mayor estabilidad a la solución numérica.

Para el caso de la celda Couette modificada definiremos los elementos de volúmen ΔV_{ij} , de radio y altura media r_i y z_j respectivamente, como el anillo concéntrico limitado por los radios $r_{i-1/2}$ y $r_{i+1/2}$ y por las alturas $z_{j-1/2}$ y $z_{j+1/2}$. Con esto, el valor de ΔV_{ij} corresponde a:

$$\Delta V_{ij} = \pi (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2) \Delta z, \qquad (3.34)$$

 $con \Delta z = z_{j+1/2} - z_{j-1/2}.$

Además, denotaremos al intervalo de tiempo entre los instantes t^n y t^{n-1} como Δt^n .

Integrando espacialmente sobre ΔV_{ij} y temporalmente sobre Δt^n la ecuación de momentum 3.33 tenenos:

$$\underbrace{\int_{\Delta V_{ij}} \int_{\Delta t^{n}} \frac{\rho}{\eta^{2}} \frac{\partial v}{\partial t} dt dV}_{I_{1}} = \underbrace{\int_{\Delta t^{n}} \int_{\Delta V_{ij}} \frac{1}{\eta r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{2} \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} dV dt}_{I_{2}} + \underbrace{\int_{\Delta t^{n}} \int_{\Delta V_{ij}} \frac{1}{\eta} \frac{\partial^{2} v}{\partial z^{2}} dV dt}_{I_{3}} + \underbrace{\int_{\Delta t^{n}} \int_{\Delta V_{ij}} \frac{1}{\eta^{2}} \left\{ \beta_{1} \frac{\partial^{2} v}{\partial r^{2}} + \beta_{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \beta_{3} \frac{\partial^{2} v}{\partial r \partial z} + \beta_{4} \frac{\partial v}{\partial z} + \beta_{5} \frac{\partial^{2} v}{\partial z^{2}} \right\} dV dt}_{I_{4}}.$$

$$(3.35)$$

Desarrollando el término I_1 de la ecuación anterior tenemos:

$$I_{1} = \int_{\Delta V_{ij}} \int_{\Delta t^{n}} \frac{\rho}{\eta^{2}} \frac{\partial v}{\partial t} dt dV$$

$$= \frac{\rho}{(\bar{\eta}^{n})^{2}} \int_{\Delta V_{ij}} v^{n} - v^{n-1} dV$$

$$= \frac{2\pi\rho}{(\bar{\eta}^{n})^{2}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (v^{n} - v^{n-1}) r dr dz$$

$$= \frac{2\pi\rho}{(\bar{\eta}^{n})^{2}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} (v^{n}_{i} - v^{n-1}_{i}) \frac{r^{2}}{2} |_{i-1/2}^{i+1/2} dz$$

$$= \frac{\pi\rho\Delta z}{(\bar{\eta}^{n})^{2}} (r^{2}_{i+1/2} - r^{2}_{i-1/2}) (v^{n}_{ij} - v^{n-1}_{ij})$$

$$= A_{i}^{n} (v^{n}_{ij} - v^{n-1}_{ij}), \qquad (3.36)$$

con $\bar{\eta}^n$ igual a la viscosidad equivalente promediada en ΔV_{ij} , usando los valores de viscosidad calculados en las 4 fronteras de este volumen. El término $\bar{\eta}^n$ es obtenido inicialmente para el instante t^{n-1} y luego recalculado iterativamente con los valores del campo de velocidad. Por otra parte A_i^n corresponde a:

$$A_i^n = \frac{\pi \rho \Delta z}{\left(\bar{\eta}^n\right)^2} (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2).$$
(3.37)

Desarrollando el término *I*₂:

$$I_{2} = \int_{\Delta t^{n}} \int_{\Delta V_{ij}} \frac{1}{\eta r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{2} \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} dV dt$$

$$= \frac{2\pi}{\bar{\eta}^{n}} \int_{\Delta t^{n}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{2} \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} r^{1} dr dz dt$$

$$= \frac{2\pi}{\bar{\eta}^{n} r_{i}} \int_{\Delta t^{n}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{r_{j-1/2}}^{r_{j+1/2}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{2} \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} dr dz dt$$

$$= \frac{2\pi}{\bar{\eta}^{n} r_{i}} \int_{\Delta t^{n}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left\{ r^{2} \frac{\partial v}{\partial r} - rv \right\} |_{i-1/2}^{i+1/2} dz dt$$

$$= \frac{2\pi \Delta z}{\bar{\eta}^{n} r_{i}} \int_{\Delta t^{n}} r^{2}_{i+1/2} \frac{v_{i+1,j} - v_{ij}}{\Delta r} - r_{i+1/2} v_{i+1/2,j} - r^{2}_{i-1/2} \frac{v_{ij} - v_{i-1,j}}{\Delta r} + r_{i-1/2} v_{i-1/2,j} dt. (3.38)$$

Considerando una formulación numérica implícita, la cual proporciona mayor estabilidad de las soluciones del sistema de ecuaciones comparada con la formulación expícita, tenemos:

$$I_{2} = \frac{2\pi\Delta z\Delta t}{\bar{\eta}^{n}r_{i}} \left\{ r_{i+1/2}^{2} \frac{v_{i+1,j}^{n} - v_{ij}^{n}}{\Delta r} - r_{i+1/2} \frac{v_{i+1,j}^{n} + v_{ij}^{n}}{2} - r_{i-1/2}^{2} \frac{v_{ij}^{n} - v_{i-1,j}^{n}}{\Delta r} + r_{i-1/2} \frac{v_{ij}^{n} + v_{i-1,j}^{n}}{2} \right\}.$$
(3.39)

El mismo procedimiento lo podemos aplicar para I₃ y I₄, obteniéndose:

$$I_{3} = \frac{2\pi r_{i}\Delta r\Delta t}{\bar{\eta}^{n}\Delta z} \left(v_{i,j+1}^{n} - 2v_{ij}^{n} + v_{i,j-1}^{n} \right)$$
(3.40)

$$I_{4} = \frac{\pi r_{i}}{(\bar{\eta}^{n})^{2}} \left[\frac{2\Delta z\Delta t\beta_{1}^{n}}{\Delta r} \left(v_{i+1,j}^{n} - 2v_{ij}^{n} + v_{i-1,j}^{n} \right) + 2\Delta z\Delta t\beta_{2}^{n} \left(v_{i+1,j}^{n} / r_{i+1} - v_{ij}^{n} / r_{i} \right) + \frac{\Delta t\beta_{3}^{n}}{2} \left(v_{i+1,j+1}^{n} - v_{i+1,j-1}^{n} - v_{i-1,j+1}^{n} + v_{i-1,j-1}^{n} \right) + 2\Delta r\beta_{4}^{n} \left(v_{i,j+1}^{n} - v_{ij}^{n} \right) + \frac{2\Delta r\beta_{5}^{n}}{\Delta z} \left(v_{i,j+1}^{n} - 2v_{ij}^{n} + v_{i,j-1}^{n} \right) \right].$$
(3.40)

Introduciendo los términos $I_1, ..., I_4$ en la ecuación 3.35 se genera un sistema de ecuaciones para los elementos interiores de la malla, donde las incógnitas corresponden a las velocidades tangenciales v_{ij} .

Para los elementos de frontera se aplicaron las siguientes condiciones de contorno:

- 1. Condición de adherencia, aplicada a las paredes del cilindro y del disco rotatorio.
- 2. Superficie libre de esfuerzos, aplicada a la superficie del medio granular:

$$\tau(r, z = H) = 0$$

3. Simetría radial, aplicada a los elementos del eje central del sistema:

$$\frac{\partial v}{\partial r}(r=0,z) = 0$$

El siguiente paso consistió en integrar la ecuación de momentum para los elementos de la perisferia aplicando las condiciones de frontera para completar el sistema de ecuaciones a resolver.

Finalmente, el sistema de ecuaciones fue resuelto de forma iterativa, recalculando los valores de los coeficientes para cada intervalo de tiempo.

3.1.5. Resultados

Comparación de los resultados del modelo continuo con datos experimentales y simulaciones discretas

Los resultados de las simulaciones numéricas obtenidos para el modelo continuo fueron comparados con los datos experimentales y simulaciones numéricas discretas obtenidas por *Cheng et al., 2006* [40] y se pueden ver en la figura 3.4. Las simulaciones numéricas fueron realizadas considerando una malla en el plano (r,z) de 30x50 elementos, un tiempo de relajación equivalente a 10 vueltas del disco, lo cual fue suficiente para alcanzar el estado estacionario, un paso de tiempo equivalente a 1/5 de vuelta y 5 iteraciones sobre el cálculo de la velocidad por cada paso de tiempo.

En la parte superior de la figura 3.4 se muestran los contornos para la velocidad de rotación normalizada por la velocidad de rotación del disco ω/Ω , asociados al modelo continuo. Estos resultados se comparan con datos de casos idénticos obtenidos de forma experimental mediante un equipo de resonancia magnética (parte central) y simulaciones numéricas discretas (parte inferior), para distintos valores del parámetro característico H/R_d . De esta figura se pueden desprender las siguientes observaciones:

- 1. Para las dos menores alturas del sistema, las simulaciones continuas presentan curvas de velocidad constante bastante cercanas a las obtenidas desde datos experimentales y simulaciones discretas. Específicamente si comparamos para $H/R_d = 0.42$, la zona comprendida desde el naranjo al azul, que es donde se produce la mayor parte del cambio de velocidad entre el disco y las paredes del cilindro, se observa que existe congruencia en las curvas de velocidad constante en los 3 casos. Ahora bien, para $H/R_d = 0.63$ existe congruencia entre la simulación continua y los datos experimentales, en particular si nos fijamos en la zona de color café, para r = 0 esta zona abarca un 66% de la altura para el caso contínuo, mientras que para el caso experimental este valor es aproximadamente de un 62% de la altura, lo que es bastante cercano.
- 2. Tanto para $H/R_d = 0.78$ como para $H/R_d = 0.88$ existe una marcada diferencia en las curvas de velocidad constante entre el modelo continuo, por un lado, y los datos experimentales y simulaciones discretas, por otro. Por ejemplo, el cortorno más cercano al disco (zona color café) está bastante sobredimensionado por las simulaciones continuas para estos dos casos.

Además, se comparó la velocidad de rotación en la superficie libre del medio granular normalizada por la velocidad del disco, contra datos obtenidos a través de simulaciones discretas realizadas por *Cheng*, 2006 [40], para distintos valores del parámetro H/R_d , como se muestra en la figura 3.5. En esta figura se puede apreciar que los valores obtenidos en las simulaciones continuas son bastante cercanos a los que arrojan las simulaciones discretas para $H/R_d < 0.7$, obteniéndose diferencias menores al 10%, por otra parte, difieren en un 20% para $H/R_d > 0.7$, lo que es consistente con las observaciones anteriores.



Figura 3.4: Velocidad de rotación normalizada por la velocidad de rotación del disco ω/Ω en celda Couette modificada para distintos valores del parámetro H/R_d . $R_d = 0.0325[m]$, d = 0.00085[m]. Parte superior: simulaciones continuas, $\omega/\Omega \in [0.84 \ 1]$ (café), [0.24, 0.84] (naranjo), $[2.4 \cdot 10^{-2}, 0.24]$ (amarillo), $[2.4 \cdot 10^{-3}, 2.4 \cdot 10^{-2}]$ (verde), $[2.4 \cdot 10^{-4}, 2.4 \cdot 10^{-3}]$ (azul) y $[0, 2.4 \cdot 10^{-4}]$ (plomo), r[m] coordenada radial, z[m] coordenada axial. Parte central: datos experimentales obtenidos a través de resonancia magnética. $\omega/\Omega = 0.84$ (\diamond), 0.24 (\blacksquare), $2.4 \cdot 10^{-2}$ (\circ), $2.4 \cdot 10^{-3}$ (\blacktriangle) y $2.4 \cdot 10^{-4}$ (\bigtriangledown) [40]. Parte inferior: resultados obtenidos a partir de simulaciones discretas [40]. Los colores corresponden a los mismos rangos indicados para la figura superior.



Figura 3.5: Velocidad de rotación en la superficie libre del medio granular normalizada por la velocidad del disco versus la relación H/R_d . Círculos: simulaciones continuas, puntos: simulaciones discretas realizadas por *Cheng et al.*, 2006 [40].

Comparación de los resultados del modelo continuo con las simulaciones realizadas por *Jop*, 2008

Los tres regímenes para la celda Couette antes señalados, han sido también obtenidos en el trabajo de *Jop*, 2008 [39] a través de simulaciones de tipo continua, considerando una reología local dependiente del número de inercia $\mu = \mu(I)$, idéntica a la mostrada en el punto anterior.

El modelo de *Jop*, 2008 resuelve la misma ecuación de momentum en coordenadas cilíndricas (r, θ, z) en la dirección θ , la que corresponde a:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\eta r^2 \frac{\partial v}{\partial r} - \eta r v \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$
(3.42)

A diferencia del modelo anterior, esta ecuación es resuelta a través de diferencias finitas sin un desarrollo matemático previo.

De este modo, a través de este modelo local tensorial, se logró obtener los resultados que muestra la figura 3.6. En esta figura aparecen, por una parte, tres sub-figuras representativas de los rangos H/R_d asociados a los tres regímenes de flujo (figura 3.6 a, b y c), en donde se pueden observar los siguientes puntos:

- 1. El modelo logra captar cualitativamente cada uno de los tres regímenes.
- 2. Las bandas de cizalle obtenidas son sumamente estrechas, sobre todo para el caso donte $H/R_d < 0.7$.
- 3. En el régimen de transición aparece una zona rotatoria sobre la zona solidaria al disco que se mueve con velocidad constante hasta alcanzar la superficie, formándose una doble banda de cizalle.

Por otro lado, la figura 3.6.d muestra un resumen de la ubicación de las bandas de cizalle para la totalidad de las simulaciones contínuas realizadas. En esta figura también es posible ver una cierta concordancia entre las zonas superficiales de las simulaciones continuas para el régimen abierto, contra datos experimentales obtenidos por *Femistein et al., 2004* [41] (línea punteada).

Además, en *Jop*, 2008 las bandas de cizalle para todos los regímenes son de espesor muy bajo, comparadas con los resultados de experimentos y simulaciones discretas obtenidas por *Cheng et al.*, 2006 [40] (ver figura 3.4). Otra diferencia notoria es que en *Cheng el al.*, 2006 el régimen de transición no presenta dos zonas rotatorias claramente diferenciadas como aparece en *Jop*, 2008 y tampoco se encontraron referencias de otros autores de este fenómeno.

La figura 3.7 muestra los resultados obtenidos con el método numérico desarrollado en la presente tesis, aplicando los mismos parámetros de las simulaciones *Jop*, 2008 (R_d , Ω , d, $\mu = \mu(I)$). En esta figura se aprecia que para $H/R_d = 0.706$ no se obtiene un régimen de transición como el de *Jop*, 2008, sino un régimen cerrado. Además para $H/R_d = 0.59$ no se obtiene un régimen abierto sino que claramente aparece un estado de transición coincidiendo con los resultados de [40] mostrados en la figura 3.4.

Por otra parte, la figura 3.8 muestra los resultados de las simulaciones continuas del modelo desarrollado numericamente en la presente tesis al bajar la relación H/R_d , en donde se aprecia que el sistema se vuelve abierto para $H/R_d = 0.45$. Además, no aparece ningún caso donde se



Figura 3.6: Resultados para simulaciones continuas obtenidos en *Jop*,2008 [39]. a-c) Velocidad de rotación normaliza $\Omega' = \Omega / \sqrt{g/d}$ v/s distancia radial y altura normalizada por el diámetro de las partículas (r/d y z/d). a) $H/R_d = 0.59$, b) $H/R_d = 0.706$ y c) $H/R_d = 0.73$. d) Posición de la banda de cizalle. Línea contínua: $H/R_d=0.39$, 0.5, 0.59, 0.63, 0.66 (sistema abierto), 0.73, 0.78, 0.84 (sistema cerrado). Línea segmentada: $H/R_d=0.700$, 0.706, 0.714 (transición). Línea punteada: posición de la banda de cizalle en la superficie obtenida experimentalmente [41]. (figura adaptada de [39]).



Figura 3.7: Velocidad de rotación normalizada ω/Ω para celda Couette modificada para los parámetro H/R_d considerados en *Jop*, 2008 [39], utilizando la reología local $\mu = \mu(I)$ y la resolución numérica detallada en el punto 3.1.4.



Figura 3.8: Velocidad de rotación normalizada ω/Ω para celda Couette modificada para valores del parámetro H/R_d mayores a los considerados en *Jop*, 2008 [39], utilizando la reología local $\mu = \mu(I)$ y la resolución numérica detallada en el punto 3.1.4.

logre distinguir dos zonas rotatorias moviéndose a distinta velocidad, una sobre otra, como en la resolución numerica de *Jop*, 2008 para $H/R_d = 0.706$.

Es importante decir que los resultados obtenidos en la figura 3.7 y 3.8 son consistentes con los resultados de la figura 3.4 superior, sin tener mayor ingerencia la geometría de la celda ni el tamaño de partícula en el tipo de régimen obtenido.

A continuación se presenta un resumen de las observaciones anteriormente vistas, respecto a la comparación entre la formulación numérica planteada en *Jop*, 2008 versus la planteada en la presente tesis:

- 1. La resolución de *Jop*, 2008 no captura el ancho de la banda de cizalle en régimen abierto, ya que este ancho es de espesor considerablemente mayor segun datos obtenidos desde simulaciones discretas y experimentos (ver figura 3.6.a y comparar con la primera columna de la figura 3.4), lo que sí se ve capturado en las simulaciones desarrolladas en la presente tesis (ver la primera columna de la figura 3.4) para $H/R_d = 0.42$).
- 2. La resolución de *Jop*, 2008 muestra que el régimen de transición presenta una zona de velocidad de rotación absolutamente constante entre la superficie y la cúpula que se mueve solidaria al disco, lo cual no aparece en los experimentos y simulaciones discretas realizados por *Cheng et al.*, 2006 (figura 3.4) y tampoco aparece en las simulaciones desarrolladas en la presente tesis.
- 3. El desarrollo numérico planteado en el presente trabajo entrega además resultados satisfactorios para $H/R_d = 0.63$ (ver figura 3.4), donde estamos en presencia de un régimen de transición.
- 4. Ninguno de los modelos entrega una buena aproximación del ancho de la banda de cizalle para el régimen denominado cerrado, ya que el desarrollo de *Jop*, *2008* muestra una banda extremadamente reducida (ver figura 3.6.c), mientras que en la resolución de la presente tesis no existe una buena aproximación en la ubicación de las curvas de nivel de velocidad (ver las últimas 2 columnas de la figura 3.4).

3.2. Block caving

3.2.1. Importancia del modelamiento del flujo granular en problemas de block caving

El método de extracción de mineral denominado *block caving* es usado ampliamente en minería subterránea y consiste básicamente en fragmentar las rocas en el interior de una montaña, en la zona donde se encuentra la veta de mineral. Luego el mineral es extraído por gravedad en la parte baja de la zona a intervenir, donde se construye una fortificación con una matriz horizontal de agujeros bajo la veta denominados puntos de extracción (*drawpoints*) (ver Fig. 3.9).

Un importante requerimiento de carácter económico para este tipo de extracción es maximizar la cantidad de material extraído. Modelos físicos desarrollados por *Kvapil*, 1964 [43] y *Marano*, 1980 [44] sugieren que un flujo homogéneo en la columna de material proporciona un máximo volumen total de extracción de material. Esta homogenización se puede lograr si la distancia entre los puntos de extracción contiguos es tal que los volúmenes movilizados de material se traslapan



Figura 3.9: Esquema para planta industrial de extracción minera tipo subterránea con tecnología Block Caving (Fuente: http://technology.infomine.com/reviews/Blockcaving/)

en una pequeña proporción [43]. Más aun, *Marano, 1980* [44] y *Heslop & Laubscher, 1981* [45] establecen un criterio dependiente del ancho del volumen movilizado para determinar, de manera aproximada, la distancia óptima entre puntos de extracción.

Por lo anterior resulta fundamental disponer de modelos que entregen de forma precisa el volumen de material movilizado para un agujero extracción aislado, lo que se denomina en términos técnicos como *zona de movimiento aislada* o *isolated movement zone* (IMZ), especificamente el ancho máximo. Esta zona queda limitada por la parte del medio granular que permanece sin movimiento y se puede determinar fácilmente de forma experimental, colocando franjas horizontales de granos de distinto color en un medio granular encerrado entre dos paredes transparentes. La zona de movimiento corresponderá en este caso a la región donde las franjas se desplazan (ver Fig. 3.10).

Por otro lado, es importante conocer también la zona de extración aislada o isolated extraction zone (IEZ) para determinar la región de donde proviene el material extraído. Esta última zona se obtiene a través de los tiempos de residencia calculados para cada punto del medio granular, como se explica a continuación. Consideremos que para un tiempo t_e , desde que comienza la extración, se ha obtenido una masa M de material. Este tiempo t_e corresponde también al tiempo de residencia de las partículas que salen del medio granular en este instante. De este modo, se puede definir la zona de extracción aislada (IEZ) como la región donde los tiempos de residencia no divergen, ya que las partículas de esta región son las que efectivamente se extraen. Esta zona de extración así definida, se utilizará en este trabajo como punto de comparación entre el modelo continuo propuesto y datos obtenidos experimentalmente, por lo que se abordará en detalle más adelante.

Es importante mencionar además que el escurrimiento para un problema real de block caving presenta fenómenos adicionales, comparado con el caso de escurrimientos en silos o tolvas, como



Figura 3.10: Esquema para volúmenes: 1) zona de movimiento aislada (IMZ) y 2) zona de extración aislada (IEZ)

lo son (1) la fragmentación secundaria, que se puede hacer efectiva en el trayecto de las rocas y (2) la migración de finos, dada por el flujo más rápido de granos de menor tamaño en determinadas zonas dentro de la cavidad de la mina [46].

3.2.2. Modelo continuo

El sistema considerado para el modelamiento del problema es el mostrado en la figura 3.11 y está compuesto básicamente por un medio granular bidimensional dentro de un recipiente rectangular. El recipiente posee una salida inferior de ancho *e* y una superficie libre en su parte superior.

Ecuaciones de conservación

El modelo utilizado para simular el escurrimiento del sistema, está constituido principalmente por las ecuaciones de conservación de momentum planteadas para el medio granular. Además, se consideraron despreciables las variaciones de densidad en el dominio, las que según *Rycroft et al., 2009* [47] son menores al 10%, acotándose las mayores variaciones a una pequeña zona en la salida. De este modo el modelo corresponde a:

$$\rho_p \phi \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\nabla \cdot \vec{v}) \vec{v} \right) = \nabla \cdot \tau - \nabla p + \rho_p \phi \vec{g}$$
(3.43)

$$\phi = cte. \tag{3.44}$$

Al igual que para la celda de Couette modificada del caso anterior, se considera la formulación tensorial de la reología local establecida en: *GDR MiDi 2004, Pouliquen et al. 2006, Jop 2008,* estas ecuaciones están dadas por:



Figura 3.11: Esquema del sistema considerado para la simulación del proceso de block caving.

$$\tau = \eta \dot{\gamma} \tag{3.45}$$

$$\eta = \frac{\mu(I)p}{|\dot{\gamma}|} \tag{3.46}$$

$$\mu = \mu_1 + \frac{\mu_2 - \mu_1}{1 + \frac{I_0}{I}} \tag{3.47}$$

$$I = \frac{\dot{\gamma}}{\sqrt{\rho_p/p}}.$$
(3.48)

Con esto la ecuación de conservación de momentum puede escribirse como:

$$\rho_p \phi \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = \eta \left(\nabla^2 \vec{v} + \nabla (\nabla \cdot \vec{v}) \right) + \dot{\gamma} \nabla \eta - \nabla p + \rho_p \phi \vec{g} \,. \tag{3.49}$$

Si bien el término $\nabla \cdot \vec{v}$, correspondiente a la divergencia de la velocidad, es cero si la densidad es considerada constante, se optó por mantenerlo ya que sin este término el medio no fluye horizontalmente, esto es, se necesita una pequeña expansión para que el medio avance horizontalmente hacia el centro del sistema y pueda hacerse efectiva la evacuación de los granos.

Además se considera que la presión varía hidrostáticamente:

$$p = g\rho_p \phi(H-y). \tag{3.50}$$

En coordenadas cartesianas el tensor velocidad de deformación está dado por:

$$\bar{\tilde{\gamma}} = \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix},$$
(3.51)



Figura 3.12: Arbol de dependencia de η .

donde u(x, y, t) y v(x, y, t) corresponden a las velocidades horizontal y vertical del medio granular respectivamente.

Las ecuaciones de conservación de momentum para cada coordenada están dadas por:

$$\rho_{p}\phi\left(\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = \eta\left(2\frac{\partial^{2}u}{\partial x^{2}}+\frac{\partial^{2}u}{\partial y^{2}}+\frac{\partial^{2}v}{\partial x\partial y}\right) + 2\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\frac{\partial \eta}{\partial y}$$
(3.52)
$$\rho_{p}\phi\left(\frac{\partial v}{\partial t}+u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = \eta\left(\frac{\partial^{2}v}{\partial x^{2}}+2\frac{\partial^{2}v}{\partial y^{2}}+\frac{\partial^{2}u}{\partial x\partial y}\right) + \left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\frac{\partial \eta}{\partial x} + 2\frac{\partial v}{\partial y}\frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial y} - \rho_{g}\phi_{g}.$$
(3.53)

Regla de la cadena aplicada a la viscosidad

La figura 3.12 muestra un esquema de las distintas variables asociadas a la viscosidad para la posterior aplicación de la regla de la cadena a esta variable:

Aplicando la regla de la cadena según el árbol de dependencia de al figura 3.12 tenemos:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial u}{\partial x}} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial u}{\partial y}} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial x}} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial y}} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \right)$$
(3.54)

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial u}{\partial x}} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial u}{\partial y}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial x}} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \frac{\partial v}{\partial y}} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial p} + \frac{\partial \eta}{\partial p} \right). \quad (3.55)$$

Estas ecuaciones se pueden escribir en términos de las segundas derivadas de la velocidad horizontal u de la forma:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \psi_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \psi_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \psi_3$$
(3.56)

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \psi_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \psi_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \psi_4, \qquad (3.57)$$

con:

$$\psi_1 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)}$$
(3.58)

$$\psi_2 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)}$$
(3.59)

$$\psi_{3} = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} \frac{\partial^{2} v}{\partial x^{2}} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} \frac{\partial^{2} v}{\partial x \partial y} \right)$$
(3.60)

$$\psi_4 = \frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial p} + \frac{\partial \eta}{\partial p} \right).$$
(3.61)

Incorporando estas dos últimas ecuaciones en la ecuación de momentum horizontal podemos escribir:

$$\Omega_1 \frac{\partial u}{\partial t} + \Omega_2 \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega_3 \frac{\partial u}{\partial y} + \Omega_4 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Omega_5 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \Omega_6, \qquad (3.62)$$

con:

$$\Omega_1 = \rho_p \phi \tag{3.63}$$

$$\Omega_2 = \rho_p \phi u \tag{3.64}$$

$$\Omega_3 = \rho_p \phi v \tag{3.65}$$

$$\Omega_4 = -2\eta - 2\frac{\partial u}{\partial x}\psi_1 \tag{3.66}$$

$$\Omega_5 = -\eta - \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\psi_2 \tag{3.67}$$

$$\Omega_6 = -2\frac{\partial u}{\partial x}\psi_2 - \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\psi_1$$
(3.68)

$$\Omega_7 = \eta \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \psi_3 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) \psi_4.$$
(3.69)

Del mismo modo, las derivadas espaciales de la viscosidad pueden ser escritas en función de las derivadas segundas de la velocidad vertical *v* como:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \zeta_1 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \zeta_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \zeta_3$$
(3.70)

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \zeta_4 \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \zeta_5 \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \zeta_6.$$
(3.71)

Por último, introduciendo estas dos ecuaciones en la ecuación de momentum vertical podemos escribir la expresión:

$$\Gamma_1 \frac{\partial v}{\partial t} + \Gamma_2 \frac{\partial v}{\partial x} + \Gamma_3 \frac{\partial v}{\partial y} + \Gamma_4 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \Gamma_5 \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = \Gamma_6.$$
(3.72)

Las ecuaciones 3.62 y 3.72, junto con las condiciones de borde explicadas a continuación, contituyen el problema a resolver numéricamente.

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno consideradas para la resolución del problema corresponden a las siguientes:

1. Agujero de salida del sistema: se considera que la velocidad de salida es vertical, constante y uniforme. Esto es (ver figura 3.11):

$$u(x < e/2, y = 0) = 0 \tag{3.73}$$

$$v(x < e/2, y = 0) = -v_0.$$
 (3.74)

2. Superficie superior: se considera la reposición de la masa extraída en el fondo (lo que implica que el sistema posee altura constante). Se considera un perfil lineal de velocidad vertical en la parte superior del sistema, que va desde el valor cero en el borde de la pared lateral, hasta un valor constante en el centro del sistema. A partir de esta condición se tiene:

$$u(x, y = H) = 0 (3.75)$$

$$v(x, y = H) = -\frac{4v_0 e}{aL}(a/2 - x).$$
(3.76)

Se prefirió un perfil lineal de velocidad en la parte superior del sistema, en vez que uno homogéneo, debido a que en este último caso se genera una inestabilidad de la solución en el borde superior del dominio (punto (a/2, H)). Esto ocurre ya que en este punto, al considerar el perfil homogéneo, la velocidad vertical pasa bruscamente desde el valor nulo, en el nodo de la pared, hasta un valor constante en el interior del medio.

- 3. Eje central: se considera simetría con respecto a este eje.
- 4. Paredes fijas: se considera la condición no deslizamiento para las paredes laterales e inferiores del cilindro.

3.2.3. Resolución numérica

Las ecuaciones de conservación de momentum 3.62 y 3.72 fueron resueltas numéricamente usando el método de volúmenes finitos (que para este caso resulta coincidente con el método de diferencias finitas), usando esquemas numéricos implícitos con diferencias del tipo *adelantadas*, obteniéndose para la coordenada *x*:

$$\Omega_{1} \frac{u_{ij}^{n} - u_{ij}^{n-1}}{\Delta t} + \Omega_{2} \frac{u_{i+1,j}^{n} - u_{ij}^{n}}{\Delta x} + \Omega_{3} \frac{u_{i,j+1}^{n} - u_{ij}^{n}}{\Delta y} + \Omega_{4} \frac{u_{i+1,j}^{n} - 2u_{ij}^{n} + u_{i-1,j}^{n}}{(\Delta x)^{2}} + \Omega_{5} \frac{u_{i,j+1}^{n} - 2u_{ij}^{n} + u_{i,j-1}^{n}}{(\Delta y)^{2}} = \Omega_{6}$$
(3.77)

Una ecuación idéntica fue planteada para la velocidad vertical. Para las dos ecuaciones de momentum expresadas de forma numérica se mantuvo el término transiente (derivada temporal), con el objetivo de alcanzar paulatinamente el régimen estacionario, lo que otorga mayor estabilidad a la solución del problema.

Como los coeficientes Ω_k dependen de los campos de velocidad horizontal y vertical, esta ecuación fue iterada en cada intervalo de tiempo hasta lograr la convergencia en estado estacionario.

En paralelo fue resuelta la ecuación de momentum vertical, con lo que se obtiene el campo de velocidades para el medio granular.

3.2.4. Resultados

Los resultados del modelo continuo fueron comparados con los datos obtenidos experimentalmente por *Castro et al., 2006* [48] para un sistema con las características mostradas en las siguiente tabla:

Base	$1800 \times 3300 [mm^2]$
Altura	3300 [<i>mm</i>]
Salida inferior	$120 \times 100 [mm^2]$
Diámetro medio partículas	18[<i>mm</i>]
Densidad granel partículas	$1900 [kg/m^3]$
Flujo másico descarga	60[kg/h]

Tabla 3.1: Dimensiones y parámetros físicos de la instalación experimetal utilizada en *Castro et al.,* 2006 [48].

Incorporando los datos de la tabla anterior al modelo continuo, se ejecutó una simulación numérica considerando los siguientes parámetros numéricos:

- Mallado de 60×60 elementos de volumen (se realizó un análisis de la convergencia de malla, arrojando que con 30×30 elementos de volumen ya no existen diferencias significativas en los resultados de velocidad).
- Lapso total de tiempo simulado 10[h].
- Número de intervalos de tiempo 10.
- Iteraciones sobre el cálculo de velocidad para cada paso de tiempo 10.

Para la reología local $\mu = \mu(I)$ se consideraron los siguientes parámetros: $\mu_1 = \tan(21^\circ)$, $\mu_2 = \tan(33^\circ)$ e $I_0 = 0.3$, extraídos de *Pouliquen et al., 2006* [29]. Estos parámetros fueron utilizados debido a que no se conoce la reología particular del medio granular del experimento.

A partir de esta simulación se obtuvieron los campos de velocidad horizontal y vertical mostrados en la figura 3.13. En esta figura se puede apreciar que existe una zona cercana a la parte inferior del sistema donde las velocidades toman valores significativos. Además se puede observar que las velocidades horizontales son un orden de magnitud menor a las velocidades verticales.

Luego, a partir de los campos de velocidades se logró obtener la zona de extracción para una salida aislada de material granular (*IEZ*). La metodología para el cálculo del *IEZ* consiste en seguir la trayectoria de distintas partículas para calcular el tiempo de residencia asociado a cada una de ellas, este procedimiento considera los siguientes pasos:

- 1. Mallado del sistema: se crea una malla con las posiciones iniciales de partículas, que en general no corresponden a los puntos donde se conoce el campo de velocidad del medio.
- 2. Cálculo del avance de cada partícula: a partir del campo de velocidades del medio granular, se interpola linealmente la velocidad instantánea de una partícula, con lo cual se determina el avance espacial para un determinado intervalo de tiempo δt fijo.
- 3. Seguimiento de la trayectoria: el proceso anterior es repetido hasta que la partícula sale del medio granular, con lo cual se genera una trayectoria que puede verse para 3 puntos elegidos al azar dentro del medio granular en la figura 3.14. La sumatoria de los intervalos de tiempo $\sum \delta t$ para cada segmento de la trayectoria, corresponde al tiempo de residencia de la partícula considerada, el cual se asocia al punto donde partió el recorrido de la partícula.
- 4. Cambio a unidades másicas: a cada tiempo de residencia obtenido se le puede asociar una masa de extracción de material, la cual corresponde a la masa que sale durante todo el tiempo que tarda en salir la partícula, por lo que las unidades del *IEZ* se pueden expresar en [kg], que es la forma usual de expresar este tipo diagramas en el ámbito de la minería.

La figura 3.15 muestra la comparación entre las zonas de extracción aislada (*IEZ*) expresadas en kilógramos de masa extraída, para el caso simulado (figura superior) y para la instalación experimental (*Castro et al., 2006*). En esta figura se pueden apreciar los siguientes puntos:

- 1. El modelo continuo logra formar una zona de extracción con un borde definido, el cual presenta una forma de campana invertida. Esta zona se forma producto de un incremento drástico de los tiempos de residencia fuera de la campana.
- 2. La zona de extracción es del mismo ancho y tiene una forma similar en ambos casos.
- 3. Los valores de masa extraída para cada punto del sistema son del mismo orden, existiendo una diferencia máxima dada por un factor de 2 entre ambos casos.
- 4. Para ambos casos existe un ángulo de falla dado por θ que limita la zona de extracción, tomando los valores de 72° para el caso del modelo continuo y 68° para el caso experimental, lo cual representa una diferencia bastante baja.

Con respecto al último punto, es importante mencionar que los modelos de tipo difusivos, ampliamente usados para simular problemas de block caving, no generan un ángulo de falla a la salida del sistema cuando se grafica el *IEZ*, como se muestra en la figura 3.16, donde se trazan las curvas



Figura 3.13: Contornos de velocidad para simulación modelo continuo. Arriba: velocidad horizontal, abajo: velocidad vertical.



Figura 3.14: Trayectoria para distintos puntos del medio granular.

de nivel de masa estraída obtenidas por *Melo et al.*, 2008 [49], las cuales tienen una forma similar a un elipsoide achatado en su base.

Para terminar, notaremos que en el modelo continuo presentado en este trabajo se impone un valor constante de la densidad en todo el medio granular, pero, por otro lado, no se considera la ecuación de conservación de masa para un fluido con densidad constante: $\nabla \cdot \vec{v} = 0$, como parte del modelo. Debido a esta razón, el término $\nabla \cdot \vec{v}$ puede resultar no nulo en parte del dominio. Esta discrepancia se estimó por medio de la variable normalizada $\frac{\nabla \cdot \vec{v}}{v_0/e}$, calculada a partir del campo de velocidades obtenido por el modelo, la cual se muestra en la figura 3.17. En esta figura, donde aparece graficado el medio granular completo y además un acercamiento de la salida del sistema, se puede visualizar que esta varible es cercana al valor nulo en todo el medio, salvo en una zona contigua a la salida del sistema de una área aproximada de $100 \times 200[mm^2]$. Por lo anterior, se estima que el error asociado a la no nulidad de la divergencia, no afecta el cálculo de los tiempos de residencia de forma significativa, debido a que el tiempo asociado al recorrido de la última parte del trayecto de las partículas, es despreciable frente a todo el tiempo que tardan las partículas en llegar cerca de la salida.



Figura 3.15: Contornos *IEZ* medidos en kilógramos de masa extraída. Arriba: simulaciones con modelo continuo. Abajo: valores obtenidos de datos experimentales (*Castro et al., 2006* [48])



Figura 3.16: Resultados para modelo difusivo aplicado a un medio granular de un experimento tipo block caving, donde fluyen partículas de arena. Líneas delgadas: trayectorias de las partículas, líneas gruesas: curvas de nivel de masa extraída (IEZ) [49].



Figura 3.17: Contorno para la divergencia de la velocidad normalizada $\frac{\nabla \cdot \vec{v}}{v_0/e}$. Arriba: Dominio espacial completo, abajo: zoom para la salida del sistema,

Capítulo 4

Relajación en medio granular cizallado

4.1. Motivación

Un avance significativo en el estudio de la reología de medios granulares densos fue establecer la ley local $\mu = \mu(I)$ [12, 13], que relaciona el esfuerzo de corte normalizado $\mu = \tau/p$, equivalente a un coeficiente de fricción efectiva, con el número de inercia $I = \dot{\gamma}d/\sqrt{p/\rho_p}$ (ver *Cap. 2* para más detalles). Esta relación se estableció a través de un análisis dimensional aplicado a un medio granular sometido a cizalle simple y fue corroborada de forma empírica para otros casos de problemas tipo cizalle en régimen estacionario.

La reología $\mu = \mu(I)$ funciona bastante bien para problemas con gradientes de velocidad de deformación $\nabla \dot{\gamma}$ cuasi-constantes, pero falla cuando estos gradientes son marcadamente variables [36]. Para dar con la reología correcta en estos casos, se ha introducido en el modelo local, un término denominado no local dado por el Laplaciano de una variable relevante, lo cual implica una relación entre la reología en un punto y el comportamiento de su entorno inmediato [36,38].

El desafío de este capítulo es explorar si estos tipos de reologías, tanto locales como no locales, poseen validez para problemas transientes, especificamente para el caso donde las variables cinemáticas y dinámicas tienen una marcada evolución temporal y espacial (ver *Rojas et al., 2015* [50] que corresponde a una publicación basada en este capítulo).

4.2. Caso de estudio

4.2.1. Configuración del sistema

La configuración del sistema o set-up está dada por una celda tipo Couette bidimensional, constituida por un medio granular dispuesto entre dos paredes rígidas, las que se mueven en dirección horizontal y sentido inverso, como la que muestra la figura 4.1.a.

Las partículas del medio interno y de las paredes son del mismo tipo y sus diámetros obedecen a una distribución uniforme en el intervalo [0.5d, 1.5d], siendo d el diámetro medio. La masa media de las partículas la designaremos como m_p .

Las dimensiones del set-up corresponden a los siguientes valores:

1. *Base*: la longitud de la base del sistema corresponde a L = 45d. Se consideran además condiciones de borde periódicas en los extremos.



Figura 4.1: a) Configuración usada para las simulaciones. Base L = 45d y alturas $H_1 = 18d$ y $H_2 = 40d$. La pared está formada por partículas con las mismas características del medio interior y se define considerando los granos con centro de gravedad dentro de un espesor W = 1.5d medido desde los bordes exteriores. b) Velocidad de deformación impuesta sobre las paredes $\dot{\gamma}_W = \pm 2U_W/H$.

- 2. *Altura*: Se utilizaron 2 alturas para el medio granular interno: $H_1 = 18d$ y $H_2 = 40d$, lo que se obtiene variando el número de granos internos que fue $N_1 = 800$ y $N_2 = 1800$ respectivamente.
- 3. *Espesor pared*: la pared está construida a partir de una nube de granos con centros de gravedad dentro de un espesor W = 1.5d.

4.2.2. Experimento numérico

El experimento numérico consiste básicamente en producir un cambio brusco de sentido en la velocidad de deformación de la celda de Couette, revirtiendo el sentido de la velocidad de la paredes instantaneamente, para lo cual fue necesario definir el protocolo que se describe a continuación.

Protocolo de ensayo

Una vez definida la configuración del sistema, se procedió a definir el ensayo numérico a través de un protocolo general que se aplicó a todas las simulaciones realizadas. Este protocolo de ensayo está contituido por las siguientes etapas:

- 1. *Preparación de la configuración inicial*: Antes de simular cada caso fue necesario obtener una configuración inicial que implicó los siguientes pasos:
 - *a*) Se liberó el movimiento vertical de las paredes y se aplicó una presión de confinamiento p_0 sobre éstas.
 - b) Luego se sometió a cizalle el sistema fijando la velocidad de las paredes superior e inferior como U_w y $-U_w$, respectivamente, generándose una tasa de deformación $\dot{\gamma}_w = 2U_w/H$. A la par, se controló el movimiento vertical de las paredes de manera de mantener constante la presión (*control pressure system*).
 - *c*) Se mantuvo la velocidad de cizallamiento hasta alcanzar el régimen estacionario.
 - *d*) Se repitió el proceso para distintas presiones de control, obteniéndose de este modo distintas configuraciones con distintas fracciones volumétricas globales ϕ_G en el medio

granular interno, de acuerdo a la relación entre presión y fracción volumétrica dada por la ecuación 2.16.

A través de este procedimiento, distintas presiones p_0 determinaron distintas configuraciones caracterizadas por ϕ_G . Para $H_1 = 18d$ y $H_2 = 40d$, las fracciones volumétricas variaron entre 0.767 < ϕ_G < 0.805 y 0.778 < ϕ_G < 0.809, respectivamente.

Cabe mencionar que las alturas H_1 y H_2 no son estrictamente constantes, pero las variaciones máximas que presentan son del orden del 3%, lo cual no representa un error significativo.

- 2. Simulación caso de estudio:
 - *a*) Se restringió el movimiento vertical de las paredes, por lo que el volumen del sistema pasa a ser constante (*control volume simulation*). La tasa de deformación se mantuvo como $\dot{\gamma}_w = 2U_w/H$ hasta alcanzar el régimen estacionario.
 - b) Se revirtió de forma instantánea el sentido de la velocidad de las paredes para imponer una nueva tasa de deformación dada por $\dot{\gamma}_w = -2U_w/H$.
 - c) Se mantuvo esta última condición hasta alcanzar el nuevo estado estacionario.
 - *d*) Este proceso fue repetido y promediado considerando 1000 y 250 ciclos para H_1 y H_2 respectivamente (ver figura 4.1.b).

Modelo numérico

Las simulaciones numéricas del sistema fueron realizadas usando un modelo de dinámica molecular bidimensional, similar al expuesto en *Luding*, 2006 [17], de propiedad del laboratorio *Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes* de la *École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris* (ESPCI), Francia. Este código fue modificado para adaptarlo al caso de estudio, lo que implicó implementar un sistema para la recopilación de datos en problemas transientes y la incorporación de condiciones de borde del problema, además de la verificación del correcto funcionamiento de los nuevos procedimientos añadidos.

Para las interacciones entre partículas el modelo considera fuerzas del tipo visco-plásticas en las direcciones normal y tangencial. Adicionalmente se incluye una fuerza de roce tangencial de tipo Coulomb. La fuerza elástica normal y tangencial se consideran como una función lineal del solapamiento entre dos partículas en colisión, con constantes de proporcionalidad k_n y k_t respectivamente. Estas constantes en un sistema de dos dimensiones poseen unidades de presión, lo que tiene una implicancia práctica en el sentido de poder definir cuándo una partícula se puede considerar rígida en relación con la presión.

La constante k_n representa el cuociente entre fuerza y deformación normal de una partícula en interacción con otra, por lo que físicamente corresponde a la rigidez superficial de la partícula. Si un sistema de granos es lo suficientemente rígido, o equivalentemente, k_n es lo suficientemente grande en relación a la presión, la dinámica del sistema se vuelve independiente de k_n y se dice que estamos en el *régimen asintótico de rigidez*. Como la respuesta del sistema se vuelve independiente de k_n , el único parámetro de entrada con unidades de tiempo es $\dot{\gamma}_w$ y, a su vez, $1/\dot{\gamma}_w$ es una escala temporal válida como unidad básica.

En nuestro experimento numérico $k_n \approx 10^{10} m_p \dot{\gamma}_w^2$, lo que es mucho mayor a los valores máximos de presión registrados inmediatamente después del cambio brusco de velocidad de las paredes



Figura 4.2: Caja o box k horizontal del sistema. El sistema fue dividido en su totalidad en cajas horizontales de tamaño $L \times \Delta y$.

del sistema, por lo tanto el sistema queda dentro del *régimen asintótico de rigidez*, para el cual fue obtenida la relación $\mu = \mu(I)$ descrita en el capítulo 2.

Por otro lado la rigidez tangencial es fijada para los ensayos como $k_t = 0.5k_n$ y los términos disipativos son calibrados de forma tal de obtener un coeficiente de restitución en el rango [0.1;0.9]. Por su parte el coeficiente de roce de Coulomb es fijado como $\mu_p = 0.4$.

Finalmente, el paso de tiempo para el cómputo de variables se considera como $\Delta t = t_{col}/25$, siendo t_{col} el tiempo de interacción medio. Este valor es lo suficientemente bajo como para asegurar el correcto cálculo de cada interacción.

4.3. Medición de variables

Para la medición de cada una de las variables de salida del sistema, el medio granular completo, incluyendo las paredes, fue dividido en pequeñas capas horizontales que llamaremos *cajas* o *boxes*, lo que se puede ver en la figura 4.2.

El volumen de cada caja corresponde a $V_b = \Delta yL$, con $\Delta y = (H + 2W)/N_b$, donde el número de divisiones N_b fue igual a 101 para las 2 alturas consideradas. Con esto es posible calcular la densidad volumétrica instantánea para el box k como:

$$\phi_k = \frac{\sum_{p \cap V_{bk}} V_p \cap V_{b_k}}{V_b},\tag{4.1}$$

donde la expresión $\sum_{p \cap V_{bk}} V_p \cap V_{bk}$ representa la región volumétrica medida de cada partícula *p* del sistema que se intersecta con el volumen del box *k*.

El campo de velocidades se calculó según la siguiente expresión:

$$\phi_k \vec{v}_k = \sum_{p \cap V_{bk}} \left(\vec{v}_{p_{cm}} + \omega_p \delta y \hat{i} \right) \frac{V_p \cap V_{b_k}}{V_b}, \qquad (4.2)$$

con $\vec{v}_{p_{cm}}$ correspondiente a la velocidad del centro de masa de la partícula p que intersecta al volumen del box k, ω_p la velocidad de rotación de la partícula p y δy la distancia vertical entre el centro de masa de la partícula y el box k. Se debe notar que la componente \hat{j} de la velocidad tangencial $\omega_p \delta y$ no aparece en la ecuación anterior, ya que el box horizontal abarca todo el ancho del sistema, lo que hace que se anule esta componente.

Para obtener el tensor de esfuerzos $\overline{\overline{\tau}}(\vec{r},t)$ a partir de las fuerzas de contacto entre las partículas, se hizo uso de la formulación de *Goldhirsch y Goldenberg*, 2004 [51]:

$$\bar{\bar{\tau}}(\vec{r},t) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j;i\neq j} \vec{f}_{ij} \otimes \vec{r}_{ij} \int_0^1 ds \Phi \left[\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij} \right] \int_{\delta t} dt' F[t-t'] -\sum_i \vec{v'}_p \otimes \vec{v'}_p \rho_p \Phi \left[\vec{r} - \vec{r}_i \right] \int_{\delta t} dt' F[t-t'], \qquad (4.3)$$

donde \vec{r}_{ij} corresponde al vector entre los centros de dos partículas $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, \vec{f}_{ij} es la fuerza de contacto, $\vec{v'}_p = \vec{v}_p(t) - \vec{v}(\vec{r}, t)$ es la fluctuación de velocidad para la partícula p y Φ y F son funciones de distribución espacial y temporal respectivamente, necesarias para pasar de forma suave desde fuerzas discretas y casi instantáneas, a esfuerzos continuos.

Para entender algo más esta fórmula pensemos en partículas de igual radio para mayor simplicidad. En este caso el punto de contacto, si es que existe, está ubicado en $\vec{c} = \frac{\vec{r}_i + \vec{r}_j}{2} = \vec{r}_i - 0.5\vec{r}_{ij}$. De este modo, se puede considerar que la distribución espacial Φ debe tener un máximo en $\vec{r} = \vec{c}$ y debiera decrecer al alejarse de este punto, por lo que se puede definir como: $\Phi = \Phi(\vec{r} - \vec{r}_c) = \Phi(\vec{r} - \vec{r}_i + 0.5\vec{r}_{ij})$, con: $\Phi(0) = \Phi_{max}$. De forma más general es necesario ponderar todo el recorrido del vector \vec{r}_{ij} , por lo que se agrega un parámetro de integración *s* con este fin, resultando la expresión: $\int_0^1 ds \Phi \left[\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}\right]$ en la primera parte de la fórmula.

Por otra parte, la integral $\int_{\delta t} dt' F[t-t']$ representa una ponderación temporal para calcular los esfuerzos en el tiempo t, tomando en cuenta la influencia de las fuerzas ocurridas dentro del intervalo δt .

Considerando esfuerzos instantáneos la función de distribución temporal por la integral toma el valor unitario $(\int_{\delta t} dt' F[t - t'] = 1)$, además se puede definir la función de distribución espacial simplificada como $\int_0^1 ds \Phi = \frac{1}{V_b}$. Por otro lado, los esfuerzos debido a las fluctuaciones de velocidad resultaron ser menores al 2%, lo que fue obtenido de simulaciones previas para el caso de estudio, por lo que podemos escribir el tensor esfuerzos para un box *k* como una sumatoria de todos los esfuerzos para los contactos *c* ocurridos dentro del box, de forma que:

$$\bar{\bar{\tau}}(k,t) = -\frac{1}{V_{b_k}} \sum_{c \in V_{b_k}} \vec{f_c} \otimes \vec{r_c}, \qquad (4.4)$$

donde $\vec{f_c}$ y $\vec{r_c}$ son equivalentes a $\vec{f_{ij}}$ y $\vec{r_{ij}}$ pero se contabilizan para cada contacto *c* dentro del box. De este modo:

$$\tau_{xx} = -\frac{1}{V_{b_k}} \sum_{c \in V_{b_k}} f_{cx} r_{cx}$$

$$(4.5)$$

$$\tau_{xy} = -\frac{1}{V_{b_k}} \sum_{c \in V_{b_k}} f_{cx} r_{cy}$$

$$\tag{4.6}$$

$$\tau_{yy} = -\frac{1}{V_{b_k}} \sum_{c \in V_{bk}} f_{cy} r_{cy} \,. \tag{4.7}$$

Por último, la velocidad de deformación $\dot{\gamma}(y_0) = \frac{\partial u}{\partial y}(y_0)$ se midió aproximando la velocidad horizontal *u* a un polinomio cúbico $u^{pol}(y)$ en las vecindades de y_0 , con lo que $\dot{\gamma}(y_0) \approx \frac{\partial u^{pol}}{\partial y}(y_0)$.



Figura 4.3: Perfil espacial estacionario para la densidad volumétrica ϕ . Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice *0* representa el valor puntual en el box central del sistema.

4.4. Estado estacionario del sistema

Como ya se ha mencionado, el caso de estudio corresponde a un problema transiente, sin embargo el estado inicial y final del sistema son puntos estacionarios que solo se diferencian en el signo de la velocidad horizontal y del esfuerzo de corte, pero no en magnitud.

También se ha dicho que el problema de cizalle simple en un medio granular denso se ha caracterizado reológicamete por una ley local descrita en *GDR MiDi*, 2004 [13], entre otros trabajos vistos en el capítulo 2 de esta tesis. A continuación analizaremos el comportamiento espacial de las variables presentes en esta reología local (ϕ , μ e *I*), además de la ley reológica propiamente tal, considerando el lapso estacionario de las simulaciones realizadas en este estudio.

La figura 4.3 muestra los perfiles estacionarios de densidad volumétrica al variar la densidad volumétrica global ϕ_G y la altura del sistema *H*, donde el subíndice *ss* simboliza el estado estacionario (*steady state*). Aquí podemos apreciar que la densidad volumétrica decrece en las cercanías de las paredes para todos los casos, de forma aproximadamente parabólica. Este decrecimiento es de la misma magnitud para la totalidad de las fracciones volumétricas correspondientes a la altura menor, lo que se advierte en la figura 4.3.b, donde los perfiles se encuentran normalizados por el valor central ϕ_0^{ss} . Este colapso no se aprecia en la figura 4.3.d, para la altura mayor del sistema, donde los casos de mayores densidades globales registran un perfil constante en la zona central.

En la figura 4.4.a se puede ver que para $H_1 = 18d$ la variable μ aumenta de forma uniforme en todo el espacio, con el incremento de la fracción volumétrica ϕ_G . En la figura 4.4.b además se aprecia que todos los perfiles para este caso son muy similares, manteniéndose una leve baja de μ cerca de las paredes, antes de la caída brusca de los valores de μ en la pared misma. Esta caída brusca es debida a que en la simulación no se computaron los valores de los esfuerzos entre



Figura 4.4: Perfil espacial estacionario para el esfuerzo de corte normalizado μ . Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice θ representa el valor puntual en el box central del sistema. Código de colores especificado en figura 4.3.

los granos que forman parte de la pared, ya que esta zona escapa de los objetivos propuestos en este estudio. Por otra parte, para $H_2 = 40d$ se puede ver un notorio cambio, ya que para fracciones volumétricas bajas, μ presenta valores mayores en la cercanía de las paredes (ver figura 4.4.d). Este comportamiento es aun más pronunciado para el número de inercia *I*, que también presenta un incremento notorio en las cercanías de las paredes para $H_2 = 40d$ (ver figura 4.5.d).

Al contrastar la relación estacionaria para la fracción volúmétrica $\phi = \phi^{cr} - mI$ propuesta en *GDR MiDi, 2004* [13], se encontró que existe una pequeña diferencia en el valor crítico de la densidad volumétrica ϕ^{cr} , al comparar esta relación obtenida para los datos promediados en el tercio central de la altura con los promedios para todo el sistema. Este fenómeno se refleja en la figura 4.6 donde se grafican estos dos casos. Además, ϕ^{cr} también presenta leves cambios al cambiar la altura del sistema. Sin embargo, en ambos casos se mantiene la linealidad de la relación y la pendiente *m*.

Es importante resaltar que las diferencias en los valores de ϕ^{cr} son del orden del 2%, por lo que la relación propuesta en *GDR MiDi*, 2004, es una buena aproximación considerando todos los casos unidos en una misma curva.

Los valores de las constantes encontradas para esta relación correspondea a: m = 0.28 (para todos los casos), $\phi_G^{cr}(H = 18d) = 0.805$, $\phi_G^{cr}(H = 40d) = 0.813$, $\phi_c^{cr}(H = 18d) = 0.813$ y $\phi_c^{cr}(H = 40d) = 0.818$, donde el subíndice G indica que la variable es global y está promediada en toda la parte fluida del medio granular, mientras que el subíndice c indica que la variable está promediada solo en el tercio central.

Para el caso del esfuerzo de corte normalizado μ en función del número de inercia *I* en estado estacionario, se excluyó la zona cercana a las paredes, promediando las variables en el tercio central



Figura 4.5: Perfil espacial estacionario para el número de inercia *I*. Figuras a) y b): $H_1 = 18d$, figuras c) y d): $H_2 = 40d$. El subíndice *0* representa el valor puntual en el box central del sistema. Código de colores especificado en figura 4.3.



Figura 4.6: Relación estacionaria para la fracción volúmétrica $\phi^{ss} = \phi^{cr} - mI^{ss}$, graficada promediando las variables en el tercio central de la altura del sistema (color azul) y para todo el sistema (color rojo). Círculos: $H_1 = 18d$, triángulos: $H_2 = 40d$. Las líneas contínuas representan ajustes lineales para los casos en los cuales se consideran las variables promediadas en todo el medio granular.



Figura 4.7: Relación estacionaria para el esfuerzo de corte normalizado $\mu = \mu(I)$, graficada promediando las variables en el tercio central de la altura del sistema. Círculos: H = 18d, triángulos: H = 40d. La línea contínua representa la realción $\mu = \mu_1 - (\mu_2 - \mu_1)/(1 + I_0/I)$ con parámetros de ajuste encontrados en *Troulsson et al.*, 2012 [18].

de la altura, debido a que esta zona es más homogénea. La figura 4.7 muestra el resultado de esta relación para las dos alturas del sistema, obteniéndose una curva de la forma propuesta en *GDR MiDi*, 2004 [13], esto es: $\mu = \mu_1 - (\mu_2 - \mu_1)/(1 + I_0/I)$. Los parámetros de ajuste para esta curva son coincidentes con los encontrados en *Troulsson et al.*, 2012 [18], estudio donde también se considera un promedio de las variables en la zona central del medio granular y corresponden a: $\mu_1 = 0.277$, $\mu_2 = 0.85$ y $I_0 = 0.364$.

4.5. Evolución espacial y temporal de variables

Para obtener una idea inicial de los resultados del experimento numérico, se pueden ver las figuras 4.8 y 4.9 que representan los campos obtenidos para las 2 alturas ensayadas, luego del cambio instantáneo en la velocidad de deformación de las paredes del sistema. A continuación resaltaremos algunos puntos importantes con respecto a estas figuras:

- Para todos las variables, salvo para el campo de presiones, existe un comportamiento espacial no homogéneo. De forma general podemos ditinguir entre una zona con grandes gradientes cercana a la pared y otra zona central donde aparecen gradientes mucho menores.
- En los campos de velocidad vertical se aprecia un flujo vertical inicial dirigido hacia el centro del sistema, el que luego se invierte hasta anularse en estado estacionario.
- En general se puede ver que el comportamiento de las variables es cualitativamente similar para ambas alturas (H₁: figura 4.8 y H₂: figura 4.9).
- En el campo de velocidad horizontal u/U_w se pueden apreciar elevados gradientes de velocidad cercanos a la pared para los primeros instantes, mientras que en la zona central, durante este mismo periodo inicial, el perfil de velocidad se mantiene siguiendo la tendencia anterior al cambio de signo de la velocidad de las paredes.


Figura 4.8: Evolución temporal y espacial luego de cambio instantáneo en la dirección de la velocidad de corte. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.790$. ϕ : fración volumétrica; u/U_w : velocidad horizontal y v/U_w : velocidad vertical, ambas normalizadas por la velocidad de la pared U_w ; $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c^{ss}$: velocidad de deformación; *I*: número de inercia; τ/τ_c^{ss} : esfuerzo de corte; p/p_c^{ss} : presión vertical y $\mu = \tau/p$: esfuerzo de corte normalizado. $\dot{\gamma}_c^{ss}$, τ_c^{ss} y p_c^{ss} representan valores promediados en el tercio central del espacio en estado estacionario.



Figura 4.9: Evolución temporal y espacial luego de cambio instantáneo en la dirección de la velocidad de corte. $H_2 = 40d$, $\phi_G = 0.796$. ϕ : fración volumétrica; u/U_w : velocidad horizontal y v/U_w : velocidad vertical, ambas normalizadas por la velocidad de la pared U_w ; $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c^{ss}$: velocidad de deformación; *I*: número de inercia; τ/τ_c^{ss} : esfuerzo de corte; p/p_c^{ss} : presión vertical y $\mu = \tau/p$: esfuerzo de corte normalizado. $\dot{\gamma}_c^{ss}$, τ_c^{ss} y p_c^{ss} representan valores promediados en el tercio central del espacio en estado estacionario.



Figura 4.10: Zona central del sistema definida como 1/3 de la altura del sistema.



Figura 4.11: Evolución temporal de la densidad volumétrica en el centro del sistema ϕ_c . Figura a): $H_1 = 18d$ y figura b): $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.

4.6. Relajación de la zona central del sistema

Debido al comportamiento singular de la zona cercana a las paredes del sistema para todas las variables, se seleccionó el tercio central de la altura del sistema como zona de estudio (ver figura 4.10). De este modo, las variables analizadas fueron promediadas para los puntos (boxes) al interior de esta zona en cada instante de tiempo, obteniéndose funciones dependientes unicamente del tiempo.

4.6.1. Relajación de la densidad volumétrica en el centro del sistema

La figura 4.11 muestra la densidad volumétrica en el tercio central del sistema en función del tiempo normalizado $t\dot{\gamma}_c^{ss}$. En esta figura se puede apreciar que para todos los casos se presenta el mismo patrón de comportamiento, ya que la densidad alcanza un valor máximo, que designaremos por ϕ_c^{MAX} , para luego relajar hasta el valor estacionario, invariablemente para todas las experiencias.

Como existe un incremento inicial de la densidad en centro del medio, también debe existir un flujo vertical inicial, desde las paredes del medio hasta el centro, que parte en el tiempo t = 0 y llega hasta $t = t(\phi_c^{MAX})$. Luego, el flujo vertical se debe invertir para recuperar el perfil de densidad estacionario. Este proceso se puede ver en la figura 4.12, donde se aprecia la inversión del perfil de velocidad vertical al comparar los perfiles antes de $t = t(\phi_c^{MAX})$ (figura 4.12.a) y después de $t = t(\phi_c^{MAX})$ (figura 4.12.b).

Una característica diferenciadora entre el flujo inicial, hacia el centro del sistema y el flujo final,



Figura 4.12: Perfiles de velocidad vertical. Figura a): perfiles desde el instante inicial hasta alcanzar $t(\phi_c^{MAX})$, figura b): desde $t(\phi_c^{MAX})$ hasta el estado estacionario. Línea azul: perfil estacionario y línea roja:perfil para $t(\phi_c^{MAX})$. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.797$.

hacia las paredes, es la velocidad del proceso. Esto se puede visualizar a través de la figura 4.13, donde la figura *a* representa el proceso inicial y la figura *b* el proceso final. Como el intervalo de tiempo entre dos perfiles cualquiera es el mismo en ambos casos, la baja densidad que poseen las líneas de los perfiles en *a* comparados a los de *b*, refleja que el proceso en *a* es sustantivamente más rápido que el proceso mostrado en *b*.

Por otro lado, definiremos ahora la nueva variable $\Delta \phi$ como la diferencia entre la densidad volumétrica en el centro del medio granular y su valor estacionario, esto es:

$$\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}. \tag{4.8}$$

Esta variable presenta una primera fase rápida hasta llegar a $\Delta \phi^{MAX} = \phi_c^{MAX} - \phi_c^{ss}$, para luego experimentar un decaimiento exponencial en una segunda etapa de relajación, lo cual se puede ver reflejado en la figuera 4.14, para todos los casos simulados.

Resumiendo, podemos decir hasta ahora sobre cada fase lo siguiente:

- 1. *Fase rápida inicial:* Una vez producido el cambio instantantáneo en la velocidad de las paredes, las partículas migran desde la zona contigua a las paredes hacia el centro del medio granular. Este flujo hacia el centro se detiene cuando se alcanza el valor máximo de densidad en el centro del medio granular. Para delimitar esta fase llamaremos $\tau_{\phi 1} = t(\phi_c^{MAX})\dot{\gamma}_c^{ss}$ al intervalo de tiempo normalizado por la velocidad de deformación $\dot{\gamma}_c^{ss}$, medida en el tercio central del espacio para el estado estacionario.
- 2. *Fase lenta final:* Luego de la primera fase rápida, aparece un flujo inverso de partículas desde el centro del medio granular hacia las paredes. Este flujo divergente es notoriamente más lento que el primero. Por otra parte, tenemos que la variable $\Delta\phi$ decae exponencial una vez sobrepasado los valores máximos de densidad, por lo que caracterizaremos esta fase a través del tiempo de relajación $\tau_{\phi 2}$, obtenido del ajuste de $\Delta\phi$ para esta fase.

Haciendo uso de la notación recién expuesta, la figura 4.15 muestra esquemáticamente los dos



Figura 4.13: Perfiles de densidad volumétrica. Figura a): perfiles desde el instante inicial hasta alcanzar $t(\phi_c^{MAX})$, figura b): desde $t(\phi_c^{MAX})$ hasta el estado estacionario. Línea azul: perfil estacionario y línea roja:perfil para $t(\phi_c^{MAX})$. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.797$.



Figura 4.14: Evolución temporal de $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}$. figura a): $H_1 = 18d$ y figura b): $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.



Figura 4.15: $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}$ en función del tiempo. $H_1 = 18d$. τ_{ϕ_1} : tiempo normalizado entre el intante inicial y el instante antes de alcanzar el máximo valor de densidad volumétrica en el tercio central del espacio. τ_{d2} : decaimiento exponencial normalizado después alcanzar el máximo valor de densidad volumétrica en el tercio central del espacio. Líneas continuas: ajuste exponencial $\phi^{fit}(t\dot{\gamma}_c^{ss}) = \exp((t-t_0)\dot{\gamma}_c^{ss}/\tau_{\phi 2}).$

tiempos de relajación asociados a las dos fases del proceso, además de las curvas de ajuste para la segunda fase.

Los tiempos de relajación $\tau_{\phi 1}$ y $\tau_{\phi 2}$ obtenidos se grafican en la figura 4.16. La figura 4.16.a muestra que el tiempo característico $\tau_{\phi 1} = t(\phi_c^{MAX})\dot{\gamma}_c^{ss}$ se relaciona linealmente con la distancia a la densidad crítica de la forma:

$$\tau_{\phi 1}(\phi_G, H) = \tau_{\phi 1}^{cr} + f_1(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G), \qquad (4.9)$$

con $f_1(H) = -1.08 + 0.112H$ y $\tau_{\phi 1}^{cr} = 0.2$.

De forma similar tenemos que:

$$\tau_{\phi 2}(\phi_G, H) = \tau_{\phi 2}^{cr} + f_2(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G)^{3/2}, \qquad (4.10)$$

con $f_2(H) = -264 + 21.3H$ y $\tau_{\phi 2}^{cr} = \tau_{\phi 1}^{cr} = 0.2$. Una observación importante es no existe un comportamiento crítico del sistema en el punto de bloqueo (*jamming*), ya que para $\phi_G = \phi_G^{cr}$ el sistema relaja a una velocidad finita caracterizada por el tiempo de relajación τ_{d2}^{cr} .

Otra observación a destacar es que $\phi_c(t)$ en ninguna de las dos fases sigue la relación ϕ_c = $\phi_c^{cr} - mI$, válida para estado estacionario, lo que puede apreciarse en la figura 4.17. Además, en esta figura se puede ver un comportamiento disímil entre las dos fases.

Relajación para el esfuerzo de corte normalizado en el centro del sis-4.6.2. tema

La evolución temporal para el esfuerzo de corte normalizado por la presión en el centro del sistema μ_c , se puede ver en la figura 4.18. La primera observación sobre esta figura, corresponde a que los casos más cercanos punto de bloqueo (*jamming*), relajan hasta el estado estacionario de



Figura 4.16: Tiempos característicos para el proceso de relajación de la densidad volumétrica. Círculos: $H_1 = 18d$, triángulos: $H_2 = 40d$. a) Tiempo de relajación para la primera fase de $\tau_{\phi 1}$. b) Tiempo de relajación para la primera fase de $\tau_{\phi 2}$.



Figura 4.17: Densidad volumétrica ϕ_c versus número de inercia I_c en el centro del sistema. La línea continua negra corresponde a la curva $\phi = \phi(I)$ para estado estacionario. Círculos: puntos estacionarios finales. $H_1 = 18d$.



Figura 4.18: Evolución temporal del esfuerzo de corte normalizado μ_c evaluado en el centro del sistema y normalizado por su valor estacionario μ_c^{ss} . a) $H_1 = 18d$, b) $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.

forma más rápida que los que están más alejados. Se aprecia además un *overshoot*, para los casos más cercamos al jamming.

En la figura 4.19 se aprecia que μ_c no se comporta siempre siguiendo la reología estacionara, surguiendo nuevamente dos fases claramente diferenciadas:

- 1. *Fase 1*: μ_c no cumple la reología local $\mu = \mu(I)$ pero se acerca a esta curva de forma rápida, lo que asociaremos a un tiempo de realajación $\tau_{\mu 1}$.
- 2. *Fase* 2: μ_c cumple la reología local $\mu = \mu(I)$ y se traslada por esta curva hasta alcanzar su valor estacionario, lo que asociaremos a un tiempo de realajación $\tau_{\mu 2}$.

Cuando la variable μ_c alcanza la curva estacionaria $\mu = \mu(I)$, comienza un desplazamiento hacia la derecha o a la izquierda hasta llegar al punto estacionario. En los casos más alejados del jamming el desplazamiento es hacia la derecha, mientras que para los casos más cercanos al jamming el desplazamiento es hacia la izquierda, produciéndose en este último caso el overshoot que aparece en la figura 4.18.

Para representar el acercamiento de la variable μ_c a la curva estacionaria $\mu = \mu(I)$, definimos una nueva variable $\Delta \mu$ como:

$$\Delta \mu = \frac{\mu(I_c(t)) - \mu_c}{\mu(I_c(t))} \,. \tag{4.11}$$

Esta nueva expresión toma el valor nulo en la segunda fase, eliminando el overshoot que existe para los casos donde existe un desplazamiento hacia la izquierda sobre la curva $\mu = \mu(I)$, como muestra la figura 4.20. Además, $\Delta \mu$ decae exponencialmente en la fase 1 como lo muestra la figura 4.21, por lo que $\tau_{\mu 1}$ lo definiremos como la constante de decaimiento exponencial para $\Delta \mu$ en la fase 1. Por su parte $\tau_{\mu 2}$ lo definiremos como la constante de decaimiento exponencial asociada a $\delta \mu = \mu_c - \mu_c^{ss}$ en la segunda fase de relajación. La variable $\delta \mu$ resultó ser bastante ruidosa, por lo que se prefirió dejarla fuera del análisis.



Figura 4.19: Esfuerzo de corte normalizado μ_c versus número de inercia I_c , ambas variables promediadas en el centro del sistema. La línea continua corresponde a la curva $\mu = \mu(I)$ para estado estacionario. Círculos: puntos estacionarios. $H_1 = 18d$. Código de colores especificado en figura 4.3.a.



Figura 4.20: Evolución temporal para la variable $\Delta \mu = \frac{\mu(I_c(t)) - \mu_c}{\mu(I_c(t))}$. a) $H_1 = 18d$, b) $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.



Figura 4.21: Evolución temporal de la variable $\Delta \mu = \frac{\mu(I_c(t)) - \mu_c}{\mu(I_c(t))}$ en el tercio central del espacio. Los puntos representan resultados de las simulaciones, mientras que las líneas representas las curvas de ajuste del tipo: $\Delta \mu^{fit} = a \exp((t\dot{\gamma}_c^{ss} - \tau_0)/\tau_{\mu 1})$. a) $H_1 = 18d$, b) $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.

La figura 4.22.a muestra los tiempos de relajación τ_{μ_1} en función de la distancia a la densidad global crítica del sistema $\phi_G^{cr} - \phi_G$. En esta figura se puede apreciar que τ_{μ_1} se comporta lineal con respecto a $\phi_G^{cr} - \phi_G$, variando la pendiente según la altura y corvergiendo al mismo punto en el jamming, dando origen a una relación del tipo:

$$\tau_{\mu 1}(\phi_G, H) = \tau_{\mu 1}^{cr} + f_3(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G), \qquad (4.12)$$

con $f_3(H) = -3.24 + 0.909H$ y $\tau_{\mu 1}^{cr} = 0.065$.

Al igual que para el caso de la relajación de la densidad volumétrica, no existe un comportamiento crítico del sistema en el jamming, ya que para $\phi_G = \phi_G^{cr}$ el sistema relaja a una velocidad finita caracterizada por el tiempo de relajación τ_{u1}^{cr} .

Mientras tanto, la figura 4.22.b muestra que existe una relación lineal entre los valores de $\tau_{\mu 1}$ y $\tau_{\phi 1}$ para H_1 , relación que se mantiene para H_2 , salvo para puntos lejos del jamming. La relación lineal corresponde a: $\tau_{\phi_1} = 3.4\tau_{\mu_1}$, lo que implica que cuando $t = t(\phi_c = \phi_c^{MAX})$, μ_c está a un 3% = exp(-3.4) de alcanzar la curva estacionaria. De este modo, $\tau_{\phi 1}$ y $\tau_{\mu 1}$ corresponden en términos prácticos a la misma fase.

4.6.3. Relajación de otras variables de importancia

En la figura 4.23 se puede ver la evolución de la mayoría de las variables en la zona central del sistema, donde se destacan con líneas verticales algunos instantes de importancia, como cuando $\Delta \mu$ se vuelve cero, lo que representa el cambio de fase entre los procesos de relajación asociados a $\tau_{\mu 1}$ y $\tau_{\mu 2}$ y cuando $t = t(\phi_c^{MAX})$, lo que representa el cambio de fase entre los procesos asociados a $\tau_{\phi 1}$ y $\tau_{\phi 2}$. A partir de esta figura se observa lo siguiente:

- 1. ϕ_c alcanza su valor máximo en un tiempo cercano al tiempo en que $\Delta \mu$ llega a cero.
- 2. El esfuerzo de corte τ_c y la presión p_c , alcanzan su estado estacionario al mismo tiempo.



Figura 4.22: Tiempos de relajación para la primera fase de relajación. Los círculos representan los puntos para $H_1 = 18d$, mientras que los triángulos representan los puntos para $H_2 = 40d$ a) τ_{μ_1} versus la distancia al valor crítico de densidad volúmetrica global del sistema, b) relación entre los tiempos de relajación para la fase 1 τ_{ϕ_1} y τ_{μ_1} . La línea recta representa la relación $\tau_{\phi_1} = 3.4\tau_{\mu_1}$

3. La variable $\Delta \mu$ llega a cero mucho antes que el esfuerzo de corte y la presión llegen a su estado estacionario.

El último punto de las observaciones anteriores es de gran importancia, ya que implica que en la fase correspondiente a $\tau_{\mu 2}$, el esfuerzo de corte y la presión evolucionan de forma correlacionada para hacer que $\mu = \tau/p$ quede dentro de la curva estacionaria.

Otra variable de importancia es la presión vertical p_{yy} (la que en general llamaremos simplemente p), la cual aparece en la definición de $\mu = \frac{\tau_{xy}}{p_{yy}} = \frac{\tau}{p}$ ya que su conocimiento, junto con μ , permite resolver la ecuación de momentum del sistema.

El comportamiento transiente de la presión normalizada por su valor estacionario, es presentado en la figura 4.24, donde se aprecia un incremento brusco de la presión apenas se realiza el cambio en la velocidad de las paredes, luego, para los casos más cercanos al jamming, la presión decae a valores mucho menores del valor estacionario.

Un test importante para la presión, es el de proporcionalidad de ésta con el cuadrado de la velocidad de deformación, lo que corresponde al escalamiento de Bagnolds, escala que a su vez puede ser obtenida despejando la presión de $I = d\dot{\gamma}/\sqrt{p/\rho_p}$ dentro de la expresión $\phi = \phi^{cr} - mI$, obteniendo $p \sim \dot{\gamma}^2/(\phi_c^{cr} - \phi_c^{ss})^2$, como fue explicado en el capítulo 2.

En la figura 4.25 se muestran los gráficos de $\hat{p} = p/p^{ss}(\phi_c^{cr} - \phi_c)^2/(\phi_c^{cr} - \phi_c^{ss})^2$ versus sgn $(\dot{\gamma}_c)(\dot{\gamma}_c/\dot{\gamma}_c)^2$ para las dos alturas del sistema consideradas en este estudio, donde se puede verificar que el escalamiento de Bagnolds, graficado de color negro, no se satisface para ninguno de los casos considerados, salvo para la segunda fase de los más alejados del jamming con $H_2 = 40d$, lo que abre una interrogante para futuros estudios tendientes a encontrar una escala para la presión en estado transiente.



Figura 4.23: Evolución temporal de variables dinámicas y cinemáticas. $H_1 = 18d$, $\phi_G = 0.790$. El instante *a* representa el tiempo para el cual el número de inercia cambia de signo ($t_a = t(I = 0)$), en *b* se alcanza la densidad máxima en el centro del sistema ($t_b = t(\phi = \phi_c^{MAX})$), en *c* $\Delta \mu$ alcanza el valor nulo ($t_c = \min(t(\Delta \mu = 0))$) y en *d* el esfuerzo de corte llega a su valor estacionario ($t_d = t(\tau_c = \tau_c^{ss})$). Todas las variables están evaluadas en el tercio central del medio granular, salvo la velocidad vertical *v*, que está evaluada a un cuarto de la altura.

4.6.4. Relación de difusión

Como ya se mencionó, la segunda fase se caracteriza por una migración de las partículas desde el centro del medio granular hacia la zona cercana a las paredes. Esta fase es mucho más lenta que la fase 1, en el sentido de que los perfiles de espaciales de densidad ϕ , evolucionan mucho más lento. Para esta segunda fase se encontró una relación del tipo difusiva para el flujo vertical, como se explicará a continuación.

La figura 4.26 muestra el flujo vertical ϕv en unidades $[d\dot{\gamma}_c^{ss}]$ dentro del medio granular versus la derivada espacial de la densidad volumétrica ϕ , donde podemos apreciar una relación lineal entre estas dos variables, luego de que el flujo alcanza su valor máximo. Esta figura fue elaborada dividiendo el medio granular en dos partes simétricas: zona central y zona pared. El gradiente $\frac{\partial \phi}{\partial y}$ $[d^{-1}]$ usado fue obtenido mediante la diferencia de ϕ entre estas dos zonas, mientras que el flujo ϕv



Figura 4.24: Evolución temporal de la presión $p = p_{yy}$ normalizada por su valor estacionario p^{ss} . a): H = 18d y b): H = 40d. Código de colores especificado en figura 4.3.

fue medido en la zona de intersección.

Las pendientes de las rectas de la figura 4.26.a representan un coeficiente efectivo de difusión $D_{\text{ef}} \left[d^2 \dot{\gamma}_c^{ss} \right]$, el que fue calculado para las dos alturas del sistema. Usando D_{ef} se graficó la relación de difusión de la figura 4.26.b que se escribe como:

$$\phi v = -D_{\rm ef} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{ss} \right), \tag{4.13}$$

donde $\frac{\partial \phi}{\partial y}\Big|_{ss}$ representa el valor estacionario del gradiente de densidad, el que al ser intoducido en esta ecuación, permite cumplir con la condición de flujo vertical nulo en estado estacionario.

Los coeficientes de difusión efectivos D_{ef} obtenidos para el sistema son los mostrados en la figura 4.27. Se aprecia que existe una relación lineal con la distancia al jamming para $H_1 = 18d$. Además, los valores de los coeficientes de difusión se distancian para las dos alturas consideradas cuando nos acercamos al jamming.

El fenómeno de difusión en la segunda fase fue ratificado a través de la escala temporal asociada a este mecanismo, comparada con el tiempo de relajación de la densidad volumétrica, como se mostrará a continuación.

En efecto, si remplazamos la expresión para el flujo de la ecuación 4.13, en la ecuación de conservación de la masa, obtenemos la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D_{\rm ef} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}.$$
(4.14)

Si consideramos una solución separable expresada como una serie de cosenos simplificada al primer término:

$$\phi = f(t)\cos\left(\frac{y}{l}\right),\tag{4.15}$$

siendo *l* la longitud característica del problema, podemos aplicar la condición de no flujo en las paredes, esto es:



Figura 4.25: Test para escala de presión de Bagnolds. $\hat{p} = p/p^{ss}(\phi_c^{cr} - \phi_c)^2/(\phi_c^{cr} - \phi_c^{ss})^2$ versus $sgn(\dot{\gamma}_c)(\dot{\gamma}_c/\dot{\gamma}_c)^2$. Línea negra: evolución según escala de Bagnolds. a: $H_1 = 18d$ y b: $H_2 = 40d$. Código de colores especificado en figura 4.3.

$$\phi v|_{H/2} = -D_{\text{ef}} \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{H/2}$$

$$(4.16)$$

$$= -\frac{D_{\rm ef}}{l} f(t) \sin\left(\frac{y}{l}\right)\Big|_{H/2}$$
(4.17)

$$= -\frac{D_{\rm ef}}{l}f(t)\sin\left(\frac{H}{2l}\right) \tag{4.18}$$

Para cumplir esta condición se tiene que la longitud caracterísica l es:

=

$$l = \frac{H}{2\pi}.$$
(4.20)

Por otra parte de la ecuación 4.14 se puede obtener el tiempo difusivo dado por:

$$\tau_{\rm diff} = \frac{l^2}{D_{\rm ef}} \dot{\gamma}_c^{ss} \tag{4.21}$$

$$= \frac{\left(\frac{\tilde{H}}{2\pi}\right)^2}{D_{\rm ef}} \dot{\gamma}_c^{ss}, \qquad (4.22)$$

donde el término $\dot{\gamma}_c^{ss}$ fue agregado para adimensionalizar el tiempo difusivo y la altura efectiva \tilde{H} es del orden de la altura del sistema ($\tilde{H} \sim H$). De los resultados de las simulaciones se obtuvo que al ajustar la altura efectiva a la relación $\tilde{H} = 1.2H$, se tiene una excelente congruencia con los tiempos de relajación τ_{d2} de la segunda fase, como muestra la figura 4.28.

La discrepancia entre la altura real del sistema y la altura efectiva puede explicarse debido a la existencia de una capa límite con un comportamiento distintivo cerca de las paredes.



Figura 4.26: a) Flujo vertical ϕv expresado en unidades $[d\dot{\gamma}_c^{ss}]$ versus gradiente espacial de la densidad volumétrica $\partial \phi / \partial y [d^{-1}]$. $H_1 = 18d$. b) Flujo vertical $\phi v [d\dot{\gamma}_c^{ss}]$ versus gradiente espacial de la densidad volumétrica $\partial \phi / \partial y [d^{-1}]$ multiplicado por $D_{ef} [d^2 \dot{\gamma}_c^{ss}]$. Lineas azules: $H_1 = 18d$ y líneas rojas: $H_2 = 40d$.



Figura 4.27: Coeficiente de difusión efectiva $D_{\rm ef} \left[d^2 \dot{\gamma}_c^{ss} \right]$ para $H_1 = 18d$ (círculos) y $H_2 = 40d$ (triángulos), calculado dividiendo el medio granular en dos partes simétricas: zona central y zona pared. El gradiente $\frac{\partial \phi}{\partial y}$ fue obtenido mediante la diferencia de ϕ entre estas dos zonas y ϕv fue medido en la zona de intersección.



Figura 4.28: Tiempo de relajación $\tau_{\phi 2}$ para $H_1 = 18d$ (círculos) y para $H_2 = 40d$ (triángulos), graficados contra la distancia al volumen crítico global elevada a 3/2, donde existe una relación lineal. La línea contínua representa el tiempo difusivo τ_{dif} calculado usando D_{ef} y la altura efectiva $\widetilde{H} = 1.2H$.

Mecanismo de difusión

Como se mencionó en el capítulo 2, para el problema de corte simple estacionario tenemos dos tiempos característicos asociados a dos mecanismos de transporte de partículas: $t_{\text{micro}} = d/\sqrt{p/\rho_p}$, asociado al tiempo que tardan los granos en entrar en un agujero de tamaño *d* debido a la presión y $t_{\text{macro}} = 1/\dot{\gamma}$, asociado a que las partículas mantengan la tendencia general del flujo. Por otro lado, en la segunda fase aparece además un tiempo difusivo que debe ser del orden de $t_{\text{dif}} = l_c^2/D_{\text{ef}}$, con l_c dada por una longitud característica asociada al proceso difusivo.

Llamaremos \dot{q}_N al flujo vertical neto por unidad de área en la segunda fase del problema. Este flujo difusivo debiera ser del orden:

$$\dot{q}_N \propto \frac{l_c}{t_{\rm dif}} = \frac{D_{\rm ef}}{l_c}.$$
 (4.23)

Una forma de simplificar el análisis para el proceso difusión vertical, es considerar inicialmente el transporte desde una capa horizontal de granos hasta otra adyacente. Este flujo es afectado por los tiempos t_{micro} y t_{macro} , que a su vez se relacionan con los siguientes procesos:

- 1. *Proceso de salida*: Las partículas deben salir de una capa y entrar en los agujeros disponibles de la capa vecina movidas por la presión, lo cual lo harán en un tiempo del orden de $t_{\text{micro}} = d/\sqrt{p/\rho_p}$.
- 2. *Proceso de entrada*: Las partículas deben entrar a un agujero de una capa vecina, pero los agujeros donde deben entrar se van moviendo a una velocidad relativa $\dot{\gamma}d$, y mientras mayor sea esta velocidad relativa, menos tiempo tendrán los granos para cambiarse de capa. Las partículas, para que se materialice el transporte, disponen de un tiempo del orden de $t_{\text{macro}} = 1/\dot{\gamma}$, que corresponde al lapso en que el agujero pasa frente a ellas.

En general, el proceso más lento determinará la velocidad del transporte vertical de las partículas.

Este fenómeno es análogo al problema de entrar a un tren en movimiento. En efecto, si queremos entrar a un tren que ya partió, aparecen los mismos mecanismos mencionados anteriormente. Por una parte, tenemos el tiempo que tardamos en pasar del anden hasta la puerta del tren (salida), y, por otro, el tiempo en que pasa la puerta del tren frente a nosotros (entrada). A mayor velocidad del tren este tiempo se acortará e imposibilitará nuestro abordaje.

Volviendo al medio granular, definiremos los valores de los tiempos característicos para la posición espacial *y* y el tiempo *t*, normalizados por sus valores estacionarios de la forma:

$$\hat{t}_{\text{micro}} = \sqrt{\frac{p^{ss}}{p(y,t)}}$$
(4.24)

$$\hat{t}_{\text{macro}} = \frac{\dot{\gamma}^{ss}(y)}{\dot{\gamma}(y,t)}.$$
(4.25)

Para la segunda fase la presión *p* sube rapidamente hasta su valor estacionario, un poco después de su inicio, por lo que: $\hat{t}_{micro} = 1$ para la mayor parte de esta fase (ver figura 4.23). Por el contrario, la velocidad de deformación demora mucho más tiempo en alcanzar su valor estacionario, ya que $\dot{\gamma}_c < \dot{\gamma}_c^{ss}$ en la fase 2, por lo que $\hat{t}_{macro} > 1$. Con esto tenemos:

$$\frac{\hat{t}_{\text{macro}}}{\hat{t}_{\text{micro}}} > 1.$$
(4.26)

Por otro lado, la relación $t_{\text{macro}}/t_{\text{micro}}$ se puede escribir como:

$$\frac{t_{\text{macro}}}{t_{\text{micro}}} = \frac{\sqrt{p/\rho_p}}{\dot{\gamma}d} \frac{\dot{\gamma}^{ss}}{\dot{\gamma}^{ss}} \sqrt{\frac{p^{ss}}{p^{ss}}}$$
(4.27)

$$= \frac{\hat{t}_{\text{macro}}}{\hat{t}_{\text{micro}}} \frac{1}{I^{ss}}.$$
(4.28)

Como en esta última ecuación $\hat{t}_{macro}/\hat{t}_{micro} > 1 \text{ y } 1/I^{ss} \gg 1$ para todas las simulaciones condideradas, se tiene que $t_{macro} \gg t_{micro}$, por lo que el proceso de flujo vertical está determinado por el proceso de entrada que es el que toma más tiempo. Además, como en el lado derecho de la ecuación 4.28 la única variable es \hat{t}_{macro} , esta variable debe dominar el proceso.

A mayor \hat{t}_{macro} hay más posibilidades de que una partícula entre a una capa vecina, ya que, como dijimos, la velocidad relativa entre capas es menor, por lo que hay más tiempo para que se haga efectivo el cambio. Debido a esto, la tasa asociada al cambio de partículas de una capa a otra \dot{q} debiera depender de una función creciente de $\hat{t}_{macro} = \dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma}$ que designaremos como $\lambda(\dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma})$, esto es:

$$\dot{q} \propto \lambda(\dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma}).$$
 (4.29)

Incorporando la escala dada en la ecuación 4.23 tenemos:

$$\dot{q} = \frac{D_{\rm ef}}{l_c} \lambda(\dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma}) \,. \tag{4.30}$$



Figura 4.29: Esquema del intercambio de partículas entre dos capas adyacentes.

Esta tasa es en ambos sentidos, es decir hacia arriba y abajo, ya que los agujeros pueden estar en cualquiera de las capas adyacentes, por lo que es necesario calcular el flujo neto \dot{q}_N entre dos capas a través de la diferencia entre los flujos de dos capas adyacentes de espesor δy (ver figura 4.29):

$$\dot{q}_N = \phi v \tag{4.31}$$

$$= \delta \dot{q} \tag{4.32}$$

$$= \dot{q} - \left(\dot{q} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial y}\delta y\right) \tag{4.33}$$

$$= -\frac{\partial \dot{q}}{\partial y}\delta y. \tag{4.34}$$

Si $\delta y = d$ y derivando \dot{q} con respecto a y según la ecuación 4.30 tenemos:

$$\dot{q}_N = -\frac{D_{\rm ef}}{l_c} \frac{\partial \lambda}{\partial y} d. \qquad (4.35)$$

A partir de los resultados de las simulaciones se obtuvo que el flujo neto se puede ajustar usando la expresión:

$$\dot{q}_N = \alpha \frac{D_{\rm ef}}{H} \left(\frac{1}{\dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y} - \left(\frac{1}{\dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y} \right) \Big|_{ss} \right), \tag{4.36}$$

lo que es válido para $\alpha = 0.9d$ luego de sobrepasado el valor máximo del flujo ϕv , abarcando la mayor parte de la fase 2, como se muestra en la figura 4.30.

Igualando las ecuaciones 4.35 y 4.36:

$$-\frac{\mathcal{D}_{\text{ef}}}{l_c}\frac{\partial\lambda}{\partial y}\mathcal{A} = 0.9\mathcal{A}\frac{\mathcal{D}_{\text{ef}}}{H}\left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial y} - \left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial y}\right)\Big|_{ss}\right)$$
(4.37)

$$-\frac{1}{l_c}\frac{\partial\lambda}{\partial y} = \frac{0.9}{H} \left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial y} - \left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial y} \right) \right|_{ss} \right)$$
(4.38)

$$-\frac{1}{l_c}\frac{\partial\lambda}{\partial y} = \frac{0.9}{H} \left(\frac{\partial\ln(\dot{\gamma})}{\partial y} - \frac{\partial\ln(\dot{\gamma})}{\partial y} \Big|_{ss} \right)$$
(4.39)

$$\frac{1}{l_c}\frac{\partial \lambda}{\partial y} = \frac{0.9}{H}\frac{\partial \ln(\gamma_{ss}/\gamma)}{\partial y}, \qquad (4.40)$$



Figura 4.30: Flujo vertical $\phi v \left[d\dot{\gamma}_c^{ss} \right]$ en función del gradiente de velocidad de deformación normalizado. Línea contínua negra: $\phi v = \alpha \frac{D_{\text{ef}}}{H} \left(\frac{1}{\dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y} - \left(\frac{1}{\dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y} \right) \Big|_{ss} \right)$, $\alpha = 0.9d$. a) $H_1 = 18d$, b) color azul: $H_1 = 18d$, color rojo: $H_2 = 40d$.

de donde:

$$l_c = \frac{H}{0.9} \tag{4.41}$$

$$\lambda(\dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma}) = \ln(\dot{\gamma}^{ss}/\dot{\gamma}) + k(t). \qquad (4.42)$$

Igualando los flujos netos de las ecuaciones 4.13 y 4.36 tenemos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial \phi}{\partial y}\Big|_{ss} = -\frac{0.9d}{H} \left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y} - \left(\frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial y}\right)\Big|_{ss}\right).$$
(4.43)

Asumiendo validez para todo y e integrando tenemos:

$$\phi - \phi^{ss} = -\frac{0.9d}{H} (\ln \dot{\gamma} - \ln \dot{\gamma}^{ss}) + c(t)$$
(4.44)

$$= \frac{0.9d}{H} \ln\left(\frac{\dot{\gamma}^{ss}}{\dot{\gamma}}\right) + c(t), \qquad (4.45)$$

donde la constante c depende del tiempo y debe anularse en estado estacionario. Considerando la zona central tenemos:

$$\phi_c = \phi_c^{ss} + 0.9 \frac{d}{H} \ln\left(\frac{\dot{\gamma}_c^{ss}}{\dot{\gamma}_c}\right) + c(t) \,. \tag{4.46}$$

Esta expresión puede ser fácilmente verificada como se muestra en la figura 4.31, donde la línea negra contínua es la predicción con pendiente m = 0.9d/H. Además, se obtiene que c = 0 para todo tiempo, así:

$$\phi_c = \phi_c^{ss} + 0.9 \frac{d}{H} \ln\left(\frac{\dot{\gamma}_c^{ss}}{\dot{\gamma}_c}\right). \tag{4.47}$$



Figura 4.31: $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}$ versus $\ln(\frac{\dot{\gamma}_c^{ss}}{\dot{\gamma}_c})$ en el centro del sistema (10% de H). Izquierda solo H = 18d, derecha: azul $H_1 = 18$ y rojo $H_2 = 40d$

Como conclusión se puede decir que en la segunda fase de relajación del sistema, la fracción volumétrica en el centro del sistema ϕ_c no es una una función del número de inercia I_c , sin embargo sigue la relación dada en la ecuación 4.47, la cual fue obtenida principalmete a partir de las siguientes hipótesis, deducciones y observaciones:

- Se observa que existe un flujo vertical de partículas en la segunda fase que fluye desde el centro del sistema hacia las paredes. Este flujo vertical sigue aproximadamente una relación difusiva según lo mostrado en la figura 4.26.
- 2. Se considera que existen dos mecanismos de importancia para que se genere este flujo volumétrico, cada uno asociado a los tiempos característicos t_{micro} y t_{macro} .
- 3. Se considera la hipótesis de que el proceso difusivo es controlado por el mecanismo más lento que forma parte del proceso.
- 4. Se observa que el proceso más lento es el asociado al tiempo característico t_{macro} , por lo que es el tiempo que domina el proceso.
- 5. A partir de las hipótesis anteriores se deduce que la variable adimensional \hat{t}_{macro} controla el proceso.
- 6. Se observa que el flujo es una función creciente de \hat{t}_{macro} .
- 7. A partir de esta última observación y de la ecuación de difusión se encuentra la expresión 4.47, que entrega la evolución temporal de la fracción volumétrica en la segunda fase del problema.

4.6.5. Test para modelo no local basado en el laplaciano del número de inercia

Como se describió en el Capítulo 2, *Bouzid et al. 2013* [38] proponen una reología no local del tipo:

$$\mu = \mu(I)(1 - \chi(\kappa)), \qquad (4.48)$$

donde $\kappa = \frac{\nabla^2 I}{I} d^2$ y $\mu(I)$ corresponde a la reología local dependiente solo de número de inercia *I*, expuesta en el capítulo 2 de este trabajo.

En particular si la función χ es considerada lineal podemos escribir:

$$\mu = \mu(I) \left(1 - \nu \frac{\nabla^2 I}{I} d^2 \right). \tag{4.49}$$

Para nuestro caso reescribiremos esta relación como:

$$\Delta \mu = \chi \left(\frac{\nabla^2 I}{I} d^2 \right), \tag{4.50}$$

con $\Delta\mu$ correspondiente a la desviación normalizada de μ con respecto a la curva local $\mu = \mu(I)$ visto anteriormente:

$$\Delta \mu = \frac{\mu(I) - \mu}{\mu(I)}.\tag{4.51}$$

El test no local consistió en verificar la ecuación 4.50 para lo cual fue necesario calcular el laplaciano de número de inercia $\nabla^2 I = \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}$. Esto se logró a través de un ajuste polinomial de *I* sobre la variable espacial *y*, con origen en el centro del medio granular. Este procedimiento fue realizado considerando dos tipos de ajuste: $I^{fit1} = a + by^2 + cy^4 + dy^6$ e $I^{fit2} = a + by^2 + cy^4$, para distintos intervalos (dominios del ajuste), con el objetivo de comprobar la independencia de los resultados con respecto al tipo de fit y el dominio considerado. La elección de exponentes pares para los ajustes, es debido a que *I* es simétrica con respecto a un eje horizontal ubicado en el centro del medio granular (*y* = 0). Para todos los casos mencionados se tiene que:

$$\frac{1}{I}\frac{\partial^2 I}{\partial y^2}(y=0) = \frac{2b}{a}.$$
(4.52)

La figura 4.32 muestra la evolución temporal de la expresión $\frac{1}{I} \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}(y=0)$ para $\phi_G = 0.767$ y $H_1 = 18d$, en donde se puede ver que esta variable alcanza rápidamente el valor nulo, luego sube su valor, para finalmente experimentar una relajación relativamente lenta. Este proceso es independiente del tipo de ajuste y del dominio considerado para éste, ya que para todos los casos la tendencia se repite sistematicamente, existiendo solo diferencias en cuanto a ruido.

La figura 4.33 muestra la evolución temporal de la variable $\Delta\mu$ para el mismo caso. Comparando esta figura con la evolución de $\frac{1}{I} \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}$, se puede apreciar que para $\Delta\mu = 0$ se tiene que $\frac{1}{I} \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}$ no es nulo, sino que relaja hasta alcanzar el valor nulo. De este modo, no se cumple la relación $\Delta\mu = v \frac{\nabla^2 I}{I} d^2$ durante la segunda fase de relajación (donde $\Delta\mu = 0$). Sin embargo, el caso analizado es el más alejado de la densidad crítica ϕ_G^{cr} y el que resultó ser más desfavorable.

Luego del analisis de la evolución temporal de las variables involucradas en la reología no-local, se procedió a chequear directamente la relación reológica de la ecuación 4.50, lo que se muestra en la figura 4.34. En esta figura se aprecia que las curvas para las distintas densidades correspondientes a la altura $H_1 = 18d$, colapsan para la primera fase de relajación (ver figura 4.34.a). Además, se aprecia que para $\Delta \mu = 0$ existe un desplazamiento hacia la derecha de la variable $\frac{1}{I} \frac{\partial^2 I}{\partial v^2}$, dado por



Figura 4.32: Evolución temporal de $\frac{1}{I} \frac{\partial^2 I}{\partial y^2}(y=0) \approx \frac{2b}{a}$ en el centro del sistema, obtenido a partir de las funciones de ajuste: $I^{fit1} = a + by^2 + cy^4 + dy^6$ y $I^{fit2} = a + by^2 + cy^4$, considerando los intervalos de ajuste indicados en cada figura. $\phi_G = 0.767$ y $H_1 = 18d$.



Figura 4.33: Evolución temporal de la variable $\Delta \mu$. $\phi_G = 0.767$ y $H_1 = 18d$.



Figura 4.34: Test no local: $\Delta \mu v/s d^2 \nabla^2 I/I$ para y = 0. a) $H_1 = 18d$, b) azul: $H_1 = 18d$, rojo: $H_2 = 40d$.

la relajación de este parámetro para la fase 2, como se comentó en el párrafo anterior. Por otro lado la figura 4.34.b muestra que el colapso visto para $H_1 = 18d$ en la primera fase, no se cumple para $H_2 = 40d$ (curvas color rojo), donde las curvas aparte de no colapsar, siguen una tendencia totalmente distinta a los casos de menor altura (curvas color azul), dada por una pendiente de signo negativo.

4.6.6. Nueva relación no local dependiente del laplaciano del esfuerzo de corte normalizado

Para modelar la desviación con respecto a la reología local que ocurre en la primera fase de relajación, se procedió a buscar una variable f que cumpliera una relación del tipo:

$$f_{loc} - f = \varphi(l_c, f, \nabla^2 f).$$
(4.53)



Figura 4.35: $\Delta \mu^* = \mu_{loc} - \mu \text{ v/s } \alpha H^2 \nabla^2 \mu$, con $\mu_{loc} = \mu(I)$ y $\alpha = 0.04$. Todas las expresiones entán evaluadas en el centro del sistema (y=0). Azul: $H_1 = 18d$, rojo: $H_2 = 40d$.

de forma similar a otros modelos no locales como los vistos en el capítulo 2 de este trabajo (por ejemplo [33, 35, 38]), donde la desviación de una variable con respecto a su valor local depende de una función de f, del laplaciano de f y de alguna longitud característica l_c . En particular se buscó una función f que cumpliese una relación del tipo:

$$f_{loc} - f = l_c^2 \nabla^2 f \,. \tag{4.54}$$

La función y la longitud característica que cumplen aproximadamente esta condición fueron el coeficiente de fricción efectiva μ y la altura del sistema *H* respectivamente. La figura 4.35 muestra que luego de un periodo inicial la relación entre $\mu_{loc} - \mu$ y $H^2 \nabla^2 \mu$ se vuelve lineal, cumpliéndose de manera aproximada:

$$\mu_{loc} - \mu = \alpha H^2 \nabla^2 \mu, \qquad (4.55)$$

donde $\mu_{loc} = \mu(I)$ y $\alpha = 0.04$.

La reología dada por la expresión $\mu_{loc} - \mu = \alpha H^2 \nabla^2 \mu$, funciona de forma aceptable luego que τ cambia de signo en la primera fase de relajación de μ , sin embargo, el que esta relación dependa de H, implica que el tamaño del experimento afecta la reología de la zona central, que es donde se evalúa la relación. Lo anterior sugiere al menos dos posibilidades: la primera es que la altura sea realmente un parámetro físico que interviene en la reología local, por ejemplo, en el caso que H esté relacionado con el tamaño de las cadenas de fuerza y, por otra parte, la segunda posibilidad es que la reología esté incompleta y que la dependencia de la altura esté asociada al hecho de que no se considera una o más variables importantes del fenómeno.

En relación a este último dilema, es necesario recalcar que los dos modelos no locales expuestos, ya sea el basado en el laplaciano del número de inercia o el basado en el laplaciano del esfuerzo normalizado, surgen de una aproximación matemática del problema, ya que corresponden a un modelo del tipo *Ginzburg-Landau*, de la misma forma que en los trabajos realizados por *Aranson et al., 2008* [33] y *Kamrin & Henann, 2014* [35]. De este modo, no existe una formulación física directa del fenómeno, por lo que resulta difícil dar una interpretación sobre la aparición de la escala de tamaño del experimento *H*, en las relaciones reológicas anteriores.

Capítulo 5

Conclusiones

El presente trabajo se dividió en dos temas principales los que fueron, por una parte, el modelamiento continuo de medios granulares en estado estacionario y, por otra, el análisis reológico de un medio granular cizallado en estado transiente.

De forma general se puede decir que los modelos reológicos utilizados en ambas instancias entregan resultados cercanos a los obtenidos en simulaciones numéricas y datos experimentales, aunque claramente queda mucho por investigar, ya que estos modelos no funcionan para todas las condiciones impuestas a los sistemas, ni para cada punto del dominio o instante considerado.

A continuación se resumen las conclusiones específicas referentes a cada tema desarrollado en la presente tesis.

5.1. Simulación continua de medios granulares estacionarios

5.1.1. Simulación de celda Couette modificada

Las simulaciones continuas basadas en una reología local del tipo $\mu = \mu(I)$ realizadas variando el parámetro característico H/R_d , que relaciona la altura del medio granular con el radio del disco giratorio para la celda Couette modificada, arrojaron resultados satisfactorios para valores bajos de H/R_d . Específicamente, para valores de $H/R_d = 0.42$ y 0.63, cuando nos encontramos dentro del rango para el cual el sistema se clasifica como abierto y cercano a la transición respectivamente, existe congruencia entre la zona que abarca la banda de cizalle entre el modelo continuo y los datos experimentales y simulaciones discretas.

Por el contrario, para valores más altos del parámetro H/R_d , específicamente para $H/R_d = 0.78$ y 0.88, el modelo continuo arroja resultados cuantitativamente distintos a los de las simulaciones discretas y los resultados experimentales, aunque cualitativamente se refleja la tendencia a una baja brusca para estos casos de la velocidad superficial del medio granular. En particular para el modelo continuo, la curva de nivel donde la velocidad de rotación del medio granular baja a un 84% de la velocidad del disco, está ubicada a un tercio y un cuarto de la altura del medio granular para estos dos casos, mientras que en la simulaciones discretas y experimentos esta curva se encuentra contigua al disco.

El principal problema que presenta el modelo continuo desarrollado en este trabajo, es que se basa en una reología local que está validada para problemas que no presentan grandes gradientes de velocidad de deformación [13]. Por el contrario, la celda Couette modificada se caracteriza por

presentar cambios bruscos de velocidad de deformación, donde se estima que cobran relevancia efectos no locales como los descritos recientemente en *Kamrin & Henann, 2014* [35]. Además, se cuenta con desarrollos continuos no locales para el mismo problema con resultados cuantitativamente satisfactorios en el trabajo de *Henann & Kamrin, 2013* [42]. Sin embargo, este modelo no local no resulta de una aproximación fenomenológica del problema, sino que más bien corresponde a un aproximación matemática.

5.1.2. Simulación de flujo granular en sistema de extracción minera tipo block caving

En este caso los resultados obtenidos por el modelo continuo local, basado en la relación $\mu = \mu(I)$, fueron comparados con datos experimentales obtenidos desde un banco de ensayo de block caving, donde el medio granular correspondió a pequeñas rocas de diámetro promedio 18[*mm*].

Concretamente se compararon las curvas de nivel para la denominada *zona de extracción aislada* (conocida por sus siglas en inglés como *IEZ*), en la cual se grafica la cantidad de masa extraída asociada al tiempo de residencia que tarda cada punto del dominio del medio granular en salir del sistema.

El principal resultado para la simulación continua de este sistema corresponde a que el modelo logra captar de manera aproximada la forma de la *zona de extración aislada (IEZ)*, definida por la parte del medio granular donde los tiempos de residencia no divergen. Además, los valores de las masas de extracción representadas en el diagrama *IEZ* son del mismo orden de magnitud para el modelo y el caso experimental.

Otro resultado importante es que el modelo continuo también capta el ángulo de falla a la salida del sistema con un 6% de error, lo que no es captado por los modelos de tipo difusivos donde la zona de extracción está dada por un elipsoide [49].

Para terminar, se debe considerar que existen diversas fuentes de error en el modelo continuo, entre otras:

- No se conoce una aproximación de reología local μ = μ(I) para el medio granular del experimento, por lo que fue necesario ocupar una reología de otro caso.
- El modelo local considera partículas esféricas, mientras que en el experimento la forma de las partículas no es esférica.
- El material granular que sale por la parte inferior del experimento no se repone, por lo que existe un cambio en la altura del sistema que puede afectar la presión.

5.1.3. Trabajos a futuro

Para el modelo continuo de la experiencia de la celda Couette modificada, una perspectiva interesante para un futuro estudio, pero ya en parte estudiada [42], está dada por la incorporación de un término no local al modelo, por ejemplo el propuesto por *Bouzid et al., 2013* [38]. Por otra parte, una idea casi inexplorada es el análisis de un problema transiente asociado a esta celda, por ejemplo: variar la velocidad de rotación del disco bruscamente o hacer que cambie paulatinamente desde cero a un valor fijo. Un estudio de este tipo podría ser desarrollado a partir de elementos discretos o a través de la observación de la superficie de un experimento y entregaría una visión

inicial acerca de la reología en un medio granular transiente, donde se generan grandes gradientes de velocidad de deformación.

Con respecto al problema de block caving, un avance importante sería obtener una aproximación de la reología $\mu = \mu(I)$ para un caso experimental y así realizar simulaciones contínuas asumiendo esta reología con los parámetros correctos. Otra idea atractiva es desarrollar un modelo discreto usando partículas compuestas, las que pueden ser esferas unidas con el objetivo de acercarce a la forma real de las partículas en el experimento y poder capturar información acerca de su reología.

5.2. Simulación discreta de un medio granular denso sometido a una inversión del sentido de cizalle

La conclusión más general de esta parte del trabajo corresponde a que para el medio bidimensional granular en cizalle, sometido a un cambio brusco en la dirección del cizallamiento, se encontró que la evolución ocurre en dos fases claramente diferenciadas. En una primera fase de carácter rápido, el centro del sistema evoluciona de acuerdo a una reología aproximadamente no local propuesta en *Bouzid et al.*, 2013 [38], pero solo para el sistema de menor altura, por lo que se propone una nueva relación no local que sí se satisfase para ambas alturas. A diferencia de lo anterior, la segunda fase del sistema sigue la reología local del tipo $\mu = \mu(I)$ propuesta en *GDR MiDi*, 2004 [13].

A continuación se describirán estos resultados de forma más extensa.

5.2.1. Relajación de la densidad volúmetrica

Las dos fases transientes del sistema tienen relación directa con la densidad. Lo anterior se fundamenta en base a que en la primera fase (rápida), existe un movimiento de partículas que migran desde la zona cercana a las paredes hasta el centro del sistema, proceso que se detiene cuando se alcanza la densidad máxina en el centro del medio granular ϕ_c^{MAX} . Luego de esto, en la segunda fase (mucho más lenta), existen partículas que se devuelven a la zona cercana a la pared recobrándose el perfil original de densidad.

Para la primera fase se definió el tiempo característico adimencional $\tau_{\phi 1} = t(\phi_c^{MAX})\dot{\gamma}_c^{ss}$, a través del cual se caracterizó la duración de la primera fase. Este tiempo resultó ser una función lineal de la distancia a la densidad global crítica del tipo: $\tau_{\phi 1}(\phi_G, H) = \tau_{\phi 1}^{cr} + f_1(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G)$.

Es importante señalar que $\tau_{\phi 1}$ no registró comportamiento crítico ya que para $\phi_G = \phi_G^{cr}$ existe un tiempo finito de relajación del sistema dado por $\tau_{\phi 1}^{cr}$.

Por otra parte, para la segunda fase de relajación de ϕ se definió la variable $\Delta \phi = \phi_c - \phi_c^{ss}$, ya que esta variable presenta una relajación exponencial en esta fase. Debido a esto fue definido el tiempo característico de relajación para la segunda fase a través de la constante de decaimiento exponencial $\tau_{\phi 2}$, calculada a través de una función de ajuste para $\Delta \phi$.

De forma similar a la fase uno, se encontró que $\tau_{\phi 2}(\phi_G, H) = \tau_{\phi 2}^{cr} + f_2(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G)^{3/2}$, no presentándose comportamiento crítico para esta variable.

5.2.2. Relajación del esfuerzo de corte normalizado

El esfuerzo de corte normalizado $\mu_c = \tau_c/p$ en el centro del sistema, presentó también dos fases de relajación luego del cambio brusco de la dirección de la velocidad de cizallamiento de las paredes del sistema. En la primera fase μ_c se acerca a la curva de reología local $\mu = \mu(I)$ y, una vez que alcanza esta curva, se produce un desplazamiento sobre ella que corresponde a la segunda fase.

Para describir el comportamiento en la primera fase se definió una nueva variable $\Delta \mu = [\mu(I_c(t)) - \mu_c]/\mu(I_c(t))$, la cual representa una función de acercamiento de μ_c a la curva local $\mu = \mu(I)$. Esta variable presentó una relajación de tipo exponencial, la que se caracterizó por la constante de decaimiento $\tau_{\mu 1}$.

De forma similar a lo ocurrido con la relajación de la densidad, se encontró que $\tau_{\mu 1}(\phi_G, H) = \tau_{\mu 1}^{cr} + f_3(H)(\phi_G^{cr} - \phi_G)$, no presentándose comportamiento crítico.

Algo interesante es que $\tau_{\phi 1}$ y $\tau_{\mu 1}$ resultaron ser proporcionales para todas las simulaciones con menor altura (H_1) y para las más cercanas a ϕ^{cr} en el caso de la altura mayor (H_2), encontrándose a través de esta relación que cuando se alcanza la densidad máxima en el centro del sistema, μ_c alcanza la curva local $\mu = \mu(I)$.

5.2.3. Reología del sistema

Como ya se mencionó, la reología para la zona central del sistema resultó dependiente de la fase de relajación en la que éste se encuentre.

Se realizó un test para verificar el desempeño de la reología no local propuesta en *Bouzid et al., 2013* [38] durante la primera fase, la cual no presentaba un comportamiento conocido. Esta reología no local del tipo $\mu = \mu(I)[1 - \chi(\kappa)]$, donde $\kappa = \frac{\nabla^2 I}{I}d^2$ y $\mu(I)$ representa la reología local, resultó satisfactoria para las simulaciones de menor altura (H_1), ya que para estos casos todas las simulaciones colapsan en una sola curva, pero falló para la altura mayor H_2 . Además se registró para los casos más alejados del punto crítico de la altura menor, una leve pero sistemática relajación de κ durante la segunda fase. Lo anterior contraviene la relación $\mu = \mu(I)[1 - \chi(\kappa)]$, ya que $\chi(\kappa)$ es una función que debe anularse en la segunda fase para reestablecer la reología local, lo que se logra sólo si κ toma el valor nulo.

Por último se realizó una búsqueda de otra variable no local que satisfaciera una ecuación del tipo: $f_{loc} - f = l_c^2 \nabla^2 f$ de forma análoga a otros modelos [35, 36]. De este modo, se encontró que la relación $\mu_{loc} - \mu = \alpha H^2 \nabla^2 \mu$, siendo $\mu_{loc} = \mu(I)$ y α constante, se satisfase para la dos alturas simuladas y para todos los puntos con $\mu > 0$ (o $\tau > 0$).

Esta nueva formulación no local, si bien se satisfase para totos los casos, es dependiente de la altura H del sistema, lo cual puede implicar por lo menos dos cosas: H es una variable que realmente tiene una ingerencia física directa sobre la reología en el centro del sistema, o, por el contrario, no tiene un rol físico directo en la reología y el hecho de aparecer en esta formulación denota que esta relación está incompleta.

5.2.4. Trabajos a futuro

Durante el desarrollo de esta parte de la investigación surgieron varias ideas de trabajos complementarios, para avanzar en el entendimiento de un medio granular denso sometido a un cambio de la dirección en la velocidad de las paredes. La idea más sencilla es cambiar la condición de borde, por ejemplo: frenar un sistema que se encuentra inicialmente en corte debido a una determinada velocidad de las paredes. Este caso tiene la ventaja, al igual que el analizado en la presente tesis, de no introducir escalas de tiempo adicionales al problema transiente.

Otro estudio, absolutamente complementario al presente trabajo, sería repetir las simulaciones pero utilizando un medio granular 3D sometido a corte simple. En este caso se podría verificar si existen efectos dimensionales o se mantienen los resultados encontrados en 2D.

Bibliografía

- Ellenbroek, W. G. (2007). Response of granular media near the jamming transition. Leiden Institute of Physics, Institute-Lorentz for Theoretical Physics, Faculty of Science, Leiden University.
- [2] Pailha, M., & Pouliquen, O. (2009). A two-phase flow description of the initiation of underwater granular avalanches. Journal of Fluid Mechanics, 633, 115-135.
- [3] Denlinger, R. P., & Iverson, R. M. (2004). Granular avalanches across irregular three dimensional terrain: 1. Theory and computation. Journal of Geophysical Research: Earth Surface (2003–2012), 109(F1).
- [4] Iverson, R. M., Logan, M., & Denlinger, R. P. (2004). Granular avalanches across irregular three dimensional terrain: 2. Experimental tests. Journal of Geophysical Research: Earth Surface (2003–2012), 109(F1).
- [5] Bartelt, P., Feistl, T., Bühler, Y., & Buser, O. (2012). Overcoming the stauchwall: Viscoelastic stress redistribution and the start of full depth gliding snow avalanches. Geophysical Research Letters, 39(16).
- [6] Basu, P. (2006). Combustion and gasification in fluidized beds. CRC press.
- [7] Lathouwers, D., & Bellan, J. (2001). Modeling of dense gas-solid reactive mixtures applied to biomass pyrolysis in a fluidized bed. International Journal of Multiphase Flow, 27(12), 2155-2187.
- [8] Zuriquel, I., & Mullin, T. (2008). The role of particle shape on the stress distribution in a sandpile. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science, 464(2089), 99–116.
- [9] Liu, C. H., Nagel, S. R., Schecter, D. A., Coppersmith, S. N., Majumdar, S., Narayan, O., & Witten, T. A. (1995). Force fluctuations in bead packs. Science, Vol. 269, 513–513.
- [10] Jotaki, T., & Moriyama, R. (1979). On the bottom pressure distribution of the bulk materials piled with the angle of repose. J. of the Soc. of Powder Technol., Japan, 16(4), 184–191.
- [11] Brockbank, R., Huntley, J. M., & Ball, R. C. (1997). Contact force distribution beneath a three-dimensional granular pile. Journal de Physique II, 7(10), 1521–1532.
- [12] Forterre, Y., & Pouliquen, O. (2008). Flows of dense granular media. Annu. Rev. Fluid Mech., 40, 1-24.

- [13] MiDi, G. D. R. (2004). On dense granular flows. The European Physical Journal E, 14(4), 341-365.
- [14] Andreotti, B., Forterre, Y., & Pouliquen, O. (2013). Granular media: between fluid and solid. Cambridge University Press.
- [15] Ogawa, S., (1978). Multi-temperature theory of granular materials. In Proc. US-Japan Sent. on Continuum Mechanical and Statistical Approaches in the Mechanics of Granular Materials, pp. 208-217.
- [16] Jop, P., Forterre, Y., & Pouliquen, O. (2006). A constitutive law for dense granular flows. Nature, 441(7094), 727-730.
- [17] Luding S., Behavior of Granular Media, p137–147, Shaker Verlag, Aachen (2006)
- [18] Trulsson, M., Andreotti, B., & Claudin, P. (2012). Transition from the viscous to inertial regime in dense suspensions. Physical Review Letters, 109(11), 118305.
- [19] Pöschel, T., & Schwager, T. (2005). Computational granular dynamics (pp. 61-65). Berlin: Springer.
- [20] Rapaport, D. C. (2004). The art of molecular dynamics simulation. Cambridge university press.
- [21] Hertz, H. (1882). Ueber die Berührung fester elastischer Körper. Journal für die reine und angewandte Mathematik, 92, 156-171.
- [22] Shafer, J., Dippel, S., & Wolf, D. E. (1996). Force schemes in simulations of granular materials. Journal de physique I, 6(1), 5-20.
- [23] Goldstein, H. (1987). Mecánica clásica. Reverté.
- [24] González J. (2009), Algoritmo eficiente para simulación de medios granulares densos, Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias, mención Física, Facultad Ciencias Físicas y Matematicas, Universidad de Chile.
- [25] Parra, C., & Soto, R. (2013). Active temperature and velocity correlations produced by a swimmer suspension. Physical Review E, 87(5), 053022.
- [26] Jean, M., & Moreau, J. J. (1992). Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In Proceedings of Contact Mechanics International Symposium, pp. 31-48.
- [27] Staron, L., & Hinch, E. J. (2005). Study of the collapse of granular columns using two dimensional discrete grain simulation. Journal of Fluid Mechanics, 545, 1-27.
- [28] Unger, T., & Kertész, J. (2003). The Contact Dynamics Method for Granular Media. In Modeling of Complex Systems (Vol. 661, pp. 116-138).
- [29] Pouliquen, O., Cassar, C., Jop, P., Forterre, Y., & Nicolas, M. (2006). Flow of dense granular material: towards simple constitutive laws. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2006(07), P07020.

- [30] da Cruz, F., Emam, S., Prochnow, M., Roux, J. N., & Chevoir, F. (2005). Rheophysics of dense granular materials: Discrete simulation of plane shear flows. Physical Review E, 72(2), 021309.
- [31] Arévalo, R. (2010). Dinámica microscópica en la descarga de silos y redes de fuerza en un medio granular rígido. Tesis para optar al grado de doctor. Universidad de Navarra.
- [32] Cortet, P. P., Bonamy, D., Daviaud, F., Dauchot, O., Dubrulle, B., & Renouf, M. (2009). Relevance of visco-plastic theory in a multi-directional inhomogeneous granular flow. EPL (Europhysics Letters), 88(1), 14001.
- [33] Aranson, I. S., Tsimring, L. S., Malloggi, F., & Clément, E. (2008). Nonlocal rheological properties of granular flows near a jamming limit. Physical Review E, 78(3), 031303.
- [34] Volfson, D., Tsimring, L. S., & Aranson, I. S. (2003). Partially fluidized shear granular flows: Continuum theory and molecular dynamics simulations. Physical Review E, 68(2), 021301.
- [35] Kamrin, K., & Henann, D. L. (2015). Nonlocal modeling of granular flows down inclines. Soft matter, 11(1), 179-185.
- [36] Kamrin, K., & Koval, G. (2012). Nonlocal constitutive relation for steady granular flow. Physical review letters, 108(17), 178301.
- [37] Goyon, J., Colin, A., Ovarlez, G., Ajdari, A., & Bocquet, L. (2008). Spatial cooperativity in soft glassy flows. Nature, 454(7200), 84-87.
- [38] Bouzid, M., Trulsson, M., Claudin, P., Clément, E., & Andreotti, B. (2013). Nonlocal Rheology of Granular Flows across Yield Conditions. Physical Review Letters, 111(23), 238301.
- [39] Jop, P. (2008). Hydrodynamic modeling of granular flows in a modified Couette cell. Physical Review E, 77(3), 032301.
- [40] Cheng, X., Lechman, J. B., Fernandez-Barbero, A., Grest, G. S., Jaeger, H. M., Karczmar, G. S., & Nagel, S. R. (2006). Three-dimensional shear in granular flow. Physical Review Letters, 96(3), 038001.
- [41] Fenistein, D., van de Meent, J. W., & van Hecke, M. (2004). Universal and wide shear zones in granular bulk flow. Physical Review Letters, 92(9), 094301.
- [42] Henann, D. L., & Kamrin, K. (2013). A predictive, size-dependent continuum model for dense granular flows. Proceedings of the National Academy of Sciences, 110(17), 6730-6735.
- [43] Kvapil, R 1964, Gravity flow of granular materials in hoppers and bins, International Journal of Rock Mechanics and Mining Science, vol. 1, pp. 35-41.
- [44] Marano, G 1980, The interaction between adjacent draw points in free flowing materials and it application to mining, Chamber of Mines Journal, vol. 22, pp. 25-32.

- [45] Heslop, TG and Laubscher, D 1981, Draw control in caving operations on Southern African chrysotile asbestos mines, in Design and operation of caving and sublevel stoping mines, ed. D Stewart, Society of Mining Engineers – AIME, New York, pp.755-774.
- [46] Laubscher, DH 2000, Block caving manual, prepared for International Caving Study, JKMRC and Itasca Consulting Group, Inc.
- [47] Rycroft, C. H., Kamrin, K., & Bazant, M. Z. (2009). Assessing continuum postulates in simulations of granular flow. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 57(5), 828-839.
- [48] Castro, R., Trueman, R., & Halim, A. (2007). A study of isolated draw zones in block caving mines by means of a large 3D physical model. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 44(6), 860-870.
- [49] Melo, F., Vivanco, F., Fuentes, C., & Apablaza, V. (2008). Kinematic model for quasi static granular displacements in block caving: Dilatancy effects on drawbody shapes. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 45(2), 248-259.
- [50] Rojas, E., Trulsson, M., Andreotti, B., Clément, E., & Soto, R. (2015). Relaxation processes after instantaneous shear-rate reversal in a dense granular flow. EPL (Europhysics Letters), 109(6), 64002.
- [51] Goldhirsch, I., & Goldenberg, C. (2004). Stress in dense granular materials. The Physics of Granular Media, 3-22.
- [52] Cortet, P.-P., Bonamy, D., Daviaud, F., Dauchot, O., Dubrulle, B., Renouf, M., *EPL*, **88** (2009) 14001.