

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**



**INSTITUTO DE FÍSICA  
«MANUEL SANDOVAL VALLARTA»**



**ANÁLISIS EXPERIMENTAL DE  
FENÓMENOS FUERA DE EQUILIBRIO EN  
MEDIOS GRANULARES**

Proyecto de Tesis para obtener el grado de  
Doctorado en Ciencias (Física)

Presenta:  
M. en C. Gustavo Manuel Rodríguez Liñán

Asesor:  
Dr. Yuri Nahmad Molinari

5 de mayo de 2017



## Resumen

En este trabajo se presentan resultados experimentales de un sistema granular cuasi-bidimensional compuesto por una mezcla de esferas y rodillos. El sistema inicia con una configuración isotrópica de los rodillos y, después de ser sometido a agitación vertical, termina con una configuración en la que los rodillos se segregan formando agregados en contacto directo entre ellos o atrapando hileras de esferas en medio de ellos. La agregación directa de rodillos está mediada por fuerzas de depleción, mientras que la agregación indirecta, donde quedan esferas atrapadas, está mediada por una inestabilidad de *clustering*.

Simulaciones numéricas de este sistema con un solo rodillo y una pared fija, así como experimentos con esta misma configuración, demuestran que existe una interacción de largo alcance no reportada hasta el momento, debida a la inestabilidad de *clustering*. Se realiza asimismo un modelo teórico para obtener el potencial de interacción, el cual depende de el coeficiente de restitución entre esferas. El modelo teórico ajusta bastante bien a los datos numéricos.



## **Abstract**

In this work, I present experimental results of a granular, quasi-twodimensional system, consisting of a mixture of spheres and rods. The system begins at an isotropic configuration for the rods and, after the system is vertically shaken, it ends up at a configuration where the rods are segregated forming aggregates in direct contact between them or trapping a line of spheres in between. The direct aggregation of rods is mediated by depletion forces, whereas the indirect aggregation, in which spheres get trapped, is mediated by a clustering instability.

Numerical simulations of this system having a single rod and a fixed wall, as well as experiments having this configuration, show that there is a long-range interaction that has not been reported yet, and that is due to a cluster instability. Likewise, a theoretical model is made in order to obtain an interaction potential, which depends on the coefficient of restitution between spheres. The model fits in good agreement with the numerical data.



## Índice general

<b>Resumen</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Fuerzas entrópicas e inducidas por fluctuaciones . . . . .	1
1.1.1. Fuerzas de depleción . . . . .	2
1.1.2. Fuerzas de Van der Waals . . . . .	3
1.1.3. Fuerzas de Casimir . . . . .	4
1.2. Materiales granulares . . . . .	5
1.2.1. Características físicas . . . . .	5
1.2.2. Comportamiento de los medios granulares . . . . .	5
1.2.3. Importancia del estudio de los materiales granulares . . . . .	7
1.3. Objetivo de la tesis . . . . .	8
<b>2. Experimentos</b>	<b>9</b>
2.1. Sistema experimental . . . . .	9
2.2. Medición de la dinámica lenta del sistema . . . . .	11
2.3. Medición de la dinámica rápida del sistema . . . . .	12
2.4. Mediciones de estabilidad de agregados . . . . .	13
2.5. Medición del potencial efectivo a pares . . . . .	13
<b>3. Simulaciones</b>	<b>15</b>
3.1. Descripción del sistema numérico . . . . .	15
3.2. Cálculo de fuerzas . . . . .	17
<b>4. Marco teórico</b>	<b>21</b>
4.1. Función de distribución y potencial de fuerza media . . . . .	21
4.2. Potencial efectivo entre dos rodillos . . . . .	22
4.3. Cálculo del camino libre medio en un gas granular bidimensional . . . . .	25
<b>5. Resultados y discusión</b>	<b>27</b>
5.1. Experimentos con varios rodillos . . . . .	27
5.2. Medición experimental del potencial efectivo . . . . .	34
5.3. Simulaciones . . . . .	35
5.4. Cálculo teórico del potencial de interacción . . . . .	37
<b>6. Conclusiones</b>	<b>45</b>



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Fuerzas entrópicas e inducidas por fluctuaciones

Se conoce como «fuerza entrópica» a aquella fuerza que aparece en un sistema termodinámico que, estando fuera del equilibrio, tiende a aumentar su entropía [1]. El incremento en la entropía provoca una reconfiguración del sistema o de una parte de este, de la cual puede medirse un desplazamiento al que se le puede asociar una fuerza aparente. Llamamos «aparentes» a estas fuerzas porque en realidad no resultan de interacciones fundamentales como las electromagnéticas, gravitacionales, etc.

Como un ejemplo muy concreto de fuerza entrópica podemos considerar el caso de un gas ideal contenido en una caja de longitud  $L$  dividida por la mitad por una pared vertical. Supongamos que inicialmente el gas se encuentra en la mitad derecha de la caja, mientras que la mitad izquierda se encuentra vacía. En esta configuración, el centro de masa del gas se encuentra en la posición  $x_{cm} = 3L/4$ . Si la pared es retirada, el gas tenderá a ocupar todo el volumen de la caja, con lo cual el centro de masa se desplazará a la posición  $x_{cm} = L/2$ . Este proceso ocurre en un tiempo finito, por lo cual se puede asociar a este desplazamiento una fuerza entrópica que lleva al centro de masa del gas de la posición inicial a la posición final. El desplazamiento no es debido a la gravedad o a interacciones electromagnéticas, sino simplemente a la maximización de la entropía del sistema.

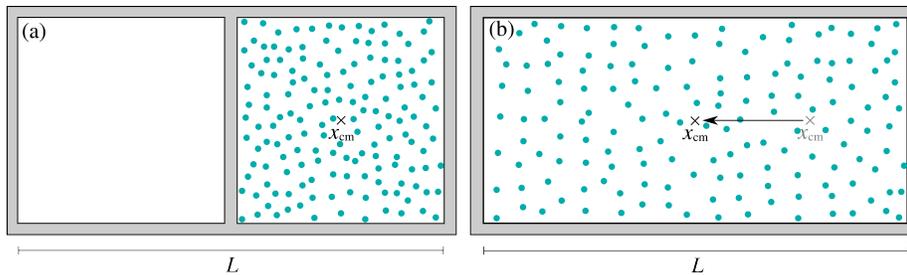


Figura 1.1: En (a), un gas ideal está contenido en la parte izquierda de un recipiente con una pared en su mitad. En este caso, la posición del centro de masa  $x_{cm}$  está en  $3L/4$ . La pared es retirada y el centro de masa del gas se desplaza desde la posición marcada en gris en (b), hasta la posición marcada en negro, ubicada en  $L/2$ .

Las «fuerzas inducidas por fluctuaciones», por otro lado, aparecen cuando existen un medio físico o un campo fluctuantes confinados [2]. Estos medios o campos pueden

ser un campo electromagnético, ondas mecánicas en un fluido, etc. El confinamiento produce un desequilibrio de fuerzas entre la región confinada y la región no confinada lo que provoca la existencia de una fuerza neta.

En esta sección se detallarán casos específicos de fuerzas entrópicas o inducidas por fluctuaciones relevantes a los sistemas granulares estudiados en este trabajo.

### 1.1.1. Fuerzas de depleción

Las fuerzas de depleción, también conocidas como fuerzas de volumen excluido, fueron descritas por primera vez en sistemas brownianos por Asakura y Oosawa en 1954 [3]. En esta descripción, ellos desarrollaron una teoría para describir la atracción entre partículas grandes inmersas en un medio compuesto por partículas pequeñas. Dicha atracción es debida a la depleción de partículas pequeñas en el espacio entre las partículas mayores. Esta clase de interacción entrópica gobierna el orden producido en sistemas coloidales al añadir algún agente depletante (usualmente un polímero o una macromolécula).

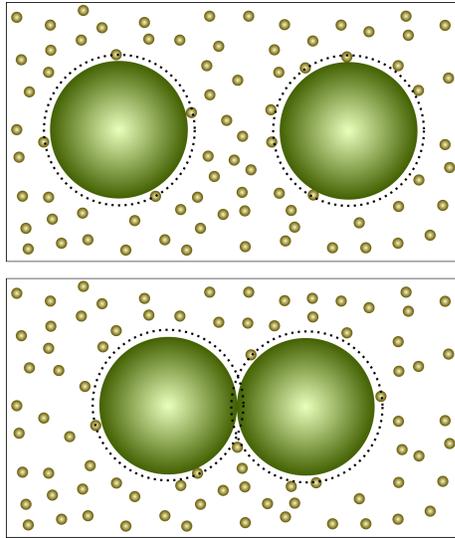


Figura 1.2: Atracción de dos partículas duras inmersas en un fluido de partículas más pequeñas. Los volúmenes excluidos (dentro de las líneas punteadas) son aquellas regiones donde las partículas del solvente no pueden penetrar. Al sobreponerse, aumenta el volumen disponible para las partículas pequeñas.

En el caso de partículas rígidas, éstas tienen prohibido penetrarse mutuamente, por lo que las posiciones de sus centros están excluidas de regiones que rodean la superficie de otras partículas (Fig. 1.2). Por otro lado, dado que las fluctuaciones térmicas a las que se encuentran sujetos los sistemas conducen a éstos a explorar el «paisaje» de entropía, se producen fenómenos como la segregación de tamaños o de formas. Esta segregación da a lugar a fases con alto grado de empaquetamiento compuestas por aquellas partículas capaces de liberar la mayor cantidad de volumen cuando se tocan una con otra. Esto crea un mayor volumen disponible a las partículas de la fase fluida, lo que incrementa la cantidad de estados accesibles al sistema y, por tanto, la entropía total.

La superposición de los *volúmenes excluidos* —definidos como el espacio en donde el centro de una partícula no puede penetrar debido a la presencia de otra partícula— determina la zona de depleción y, por lo tanto, la intensidad de la *fuerza de depleción*. Esta fuerza originará una segregación si existe alguna diferencia de formas, tamaños o cualesquiera otras propiedades geométricas.

En el mismo sentido, podemos definir un *volumen liberado* como una nueva región en la cual los centros de partículas tienen permitido moverse cuando se superponen volúmenes excluidos. Es decir, el volumen liberado queda definido como la suma de los volúmenes excluidos de dos partículas duras cuando éstas se encuentran separadas, menos el volumen excluido de estas mismas dos partículas cuando éstas se encuentran en contacto. Aunque la entropía de aquellas partículas que son capaces de liberar la mayor cantidad de volumen disminuye cuando se encuentran en una fase condensada, esta condensación provoca la creación de nuevo volumen liberado, en el cual las partículas pequeñas ahora tienen la posibilidad de moverse. Esto, a su vez, provoca un aumento en la entropía global del sistema. Asimismo, a presiones o densidades lo suficientemente altas, en un gas de esferas duras se da una coexistencia de fases sólida y líquida a una fracción de llenado de 0.492 (o 0.69 para el caso bidimensional), «en donde el “pegamento” usual debido a las interacciones atractivas entre partículas es remplazado por la presión [4]».

Las fuerzas de depleción han sido extensamente investigadas en escalas coloidales [5]. En estos sistemas, la intensidad de la fuerza de depleción depende directamente de la presión ejercida desde la región externa, que no ha sido vaciada de partículas. Esta presión, a su vez, depende de la velocidad cuadrática media de las partículas circundantes, es decir, de la temperatura de la suspensión. En este sentido, al incrementar la temperatura del sistema ocurre un aumento en la atracción debida a la depleción. El desequilibrio entre las presiones en las zonas interna (la que ha sido vaciada de partículas) y externa da lugar a la atracción efectiva.

Otros sistemas en donde se ha estudiado en profundidad la fuerza de depleción es en sistemas biofísicos, tales como mezclas de coloides y virus [6] y en partículas biológicas planas, tales como los eritrocitos [5], así como en sistemas granulares [7, 8, 9, 10, 11]. Además, estas fuerzas de depleción pueden producir un efecto de capas de hidratación en sistemas coloidales [5] que aún no ha sido observado en medios granulares.

### 1.1.2. Fuerzas de Van der Waals

Las fuerzas de Van der Waals son el tipo de fuerzas inducidas por fluctuaciones más conocidas. En este caso, el medio fluctuante es el campo electromagnético dentro de condiciones de frontera de diferentes cuerpos; dichas fluctuaciones pueden tener un origen mecánico-cuántico o térmico [12]. La intensidad de estas fuerzas, que pueden ser atractivas o repulsivas, suele decaer como  $r^{-7}$ , donde  $r$  es la distancia entre los cuerpos que sienten dichas fuerzas.

En el caso de fluctuaciones térmicas, estas dan lugar a fuerzas entre dipolos, cuadrupolos, etc., permanentes y son conocidas como interacciones de Keesom [13]. Por otro lado, en el caso de moléculas sobre las que se induce un dipolo debido a la presencia de un dipolo permanente, las fluctuaciones ocurren gracias a la libertad que tiene

el dipolo inducido de cambiar su orientación sobre la molécula polarizada. Este último caso da lugar a la fuerza de Debye [14]. Asimismo, las fluctuaciones en las nubes electrónicas de átomos y moléculas son capaces de producir una interacción efectiva entre estos cuerpos, en los cuales las fluctuaciones inducen dipolos. Este tipo de fuerzas son conocidas como fuerzas de dispersión de London [15].

### 1.1.3. Fuerzas de Casimir

Cuando existen fluctuaciones cuánticas de un campo electromagnético confinado entre dos placas conductoras aterrizadas, aparece una fuerza atractiva entre estos objetos que es conocida como «fuerza de Casimir» [16]. Las condiciones de frontera impuestas por las placas provocan que, en la región interior a estas, solamente puedan existir modos fluctuantes cuyas longitudes de onda satisfagan dichas condiciones. Por otro lado, en la región exterior a las placas, los modos fluctuantes no tienen ninguna restricción. Esto genera un desequilibrio en las presiones de radiación dentro y fuera de las placas lo que resulta en una fuerza neta atractiva entre ellas.<sup>1</sup>

Aunque las fuerzas de Casimir fueron descritas inicialmente como un fenómeno de electrodinámica cuántica, Pierre-Gilles de Gennes predijo en 1978 la existencia de fuerzas atractivas entre dos objetos sumergidos en una mezcla binaria cerca de su punto crítico [18]. Por analogía con las fuerzas de Casimir cuánticas, a estas fuerzas predichas por de Gennes se les dio el nombre de «fuerzas de Casimir críticas». En este caso, las fluctuaciones son los cambios en la concentración de los dos fluidos que componen la mezcla. Estas fluctuaciones se van haciendo más grandes conforme la mezcla se va acercando al punto crítico. No obstante, un cuerpo sumergido dentro de esta mezcla impone una condición de frontera donde uno de los componentes tiende a nuclear sobre su superficie, lo que detiene las fluctuaciones en este punto. Esto provoca una fuerza neta sobre dos cuerpos inmersos en estos medios, la cual puede ser atractiva o repulsiva.

Treinta años después de su predicción, la existencia de la fuerza de Casimir crítica fue demostrada por el grupo de Sigfried Dietrich [19] en una mezcla binaria de agua y lutidina, dentro de la cual se encontraba una partícula coloidal. Por medio de técnicas ópticas, la posición de la partícula coloidal como función del tiempo fue medida con respecto a una superficie plana. Los autores obtuvieron una función de distribución de posiciones, a partir de la cual, por medio de técnicas estadísticas (véase la sección 4.1), midieron la fuerza entre la partícula coloidal y el superficie.

De manera similar a los casos anteriores, otros autores han predicho la existencia de fuerzas de Casimir en medios granulares [21, 22, 23]. En estos casos las fluctuaciones son el movimiento de las partículas del material y las condiciones de frontera son impuestas por dos cuerpos dentro de él. La naturaleza inelástica de las colisiones entre los granos del medio y los cuerpos «intrusos» provocaría una reducción del movimiento, lo que, de manera similar al efecto Casimir crítico, generaría una fuerza atractiva o repulsiva, dependiendo de las circunstancias específicas, entre los objetos inmersos en el material. Una predicción importante es el hecho de que la intensidad de estas fuerzas es directamente proporcional a la intensidad de las fluctuaciones del medio granular.

---

<sup>1</sup>Las fuerzas de Casimir son principalmente fuerzas atractivas. Sin embargo, en ciertas circunstancias especiales, es posible obtener fuerzas de Casimir repulsivas [17].

**1.2. *Materiales granulares*****1.2.1. *Características físicas***

Se consideran como *materiales granulares* a todas aquellas aglomeraciones de partículas sólidas macroscópicas, de tamaños mayores a unos 100  $\mu\text{m}$ , cuyas únicas interacciones entre dichas partículas son las colisiones y las fuerzas de fricción estática y dinámica. Como ejemplo de materiales granulares están las semillas, la grava, la nieve, la arena, etc (Figura 1.3).



Figura 1.3: *Ejemplos de materiales granulares: esferas de plástico, grava, lentejas y semillas de ajonjolí. Fuente: Wikimedia Commons.*

De forma muy ideal, la materia granular se puede considerar como un conjunto de esferas duras atómicas, donde movimiento browniano es despreciable, la energía es introducida a través de las fronteras del sistema y las interacciones entre partículas producen una disipación de la energía debido a la fricción y a la inelasticidad de las colisiones. Pueden verse, pues, como un gas de esferas duras disipativas en el que, además, el volumen finito de las partículas da lugar a efectos de volumen excluido, como suele ocurrir en los gases de esferas duras comunes.

**1.2.2. *Comportamiento de los medios granulares***

Dependiendo de las condiciones en las que se encuentren, los medios granulares pueden tener comportamientos semejantes a otros sistemas. Por ejemplo, a pesar de que esta forma de materia está compuesta por objetos sólidos, como conjunto pueden tener un comportamiento similar al de un líquido, como la arena al fluir dentro de un reloj [20]. En otras circunstancias, cuando la separación entre partículas es considerable —por ejemplo, en los anillos planetarios [24]— o cuando están sujetas a fuertes aceleraciones, la materia granular puede comportarse como un gas [26]. En otros casos, cuando cesa la inyección de energía externa, esta forma de materia suele condensar rápidamente para formar pilas de material o, en el caso de materia granular en el espacio, puede formar asteroides o cometas [25]. En otras palabras, dependiendo de las condiciones externas, los materiales granulares se comportan de forma semejante a estados clásicos de la materia: sólido, líquido o gaseoso [26].

El hecho de las interacciones entre las partículas que conforman a los materiales granulares son esencialmente disipativas provoca que el comportamiento global de este tipo de sistemas dé lugar a fenómenos no intuitivos. Por ejemplo, si se tiene un material granular sujeto a agitación dentro de un contenedor dividido en compartimientos comunicados, donde existe la misma cantidad de material en cada compartimiento, se esperaría que la cantidad de material se mantenga similar durante el transcurso del tiempo. Sin embargo, se observa que para ciertas aceleraciones de agitación, el material tiende a concentrarse en uno de los compartimientos, hasta que finalmente todo él termina en uno solo de ellos [27] (Fig. 1.4).

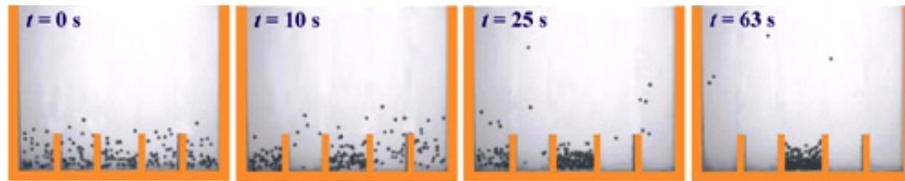


Figura 1.4: *Material granular confinado en un contenedor dividido en compartimientos y sometido a agitación vertical. Después de un tiempo, el material tiende a acumularse en uno de los compartimientos, en lugar de distribuirse de forma uniforme en todos ellos. Tomado de Van der Meer (2004) [27].*

Los medios granulares compuestos de dos especies de partículas y sometidos a agitación suelen presentar fenómenos de segregación, es decir, el sistema se separa después de un tiempo en dos fases. Uno de los fenómenos de segregación más conocidos en la materia granular es el llamado «efecto de las nueces del Brasil», en el cual un medio granulado es sometido a agitación, y en el fondo del mismo se coloca un intruso de dimensiones mayores a los granos del medio. Después de un tiempo el intruso termina en la parte superior del granulado [28]. El comportamiento contraintuitivo en este caso es que, si el intruso tiene mayor densidad que los granos del medio, la configuración de menor energía es aquella en la que el intruso se encuentra en la parte inferior. Sin embargo, la configuración final siempre es aquella en la que el intruso termina en la parte superior. La segregación en los materiales granulares también puede darse en sentido horizontal. En este caso, cuando una serie de intrusos se encuentran en un medio sometido a agitación, los efectos de volumen excluido (véase la sección 1.1.1) provocan una atracción efectiva entre los intrusos, quienes terminan segregados con respecto al resto del medio [9]. De la misma manera, se ha demostrado experimentalmente que las fluctuaciones en el movimiento de los granos del medio granulado puede generar una segregación horizontal [29], lo que indicaría la existencia de una fuerza de largo alcance inducida por estas fluctuaciones.

Cuando a un material granular se le inyecta persistentemente energía, la disipación de energía debida a las colisiones inelásticas y la fricción tienden a llevar al sistema a un estado donde la tasa de energía inyectada es igual a la tasa de energía disipada. Este estado es conocido como un *estado estacionario*; los estados estacionarios en los materiales granulares guardan similitud con los estados de equilibrio de una fase ga-

seosa. No obstante, a diferencia de un sistema conservativo, la disipación inherente a un medio granulado genera fenómenos nuevos. Por ejemplo, cuando la densidad numérica de partículas es lo suficientemente alta para una velocidad cuadrática media dada, el número de colisiones por unidad de tiempo aumenta con la disminución de la distancia promedio entre partículas, lo que aumenta la energía disipada por unidad de tiempo. El ejemplo anterior es conocido como «inestabilidad de *clustering*» [30] y da lugar a separación de fases en medios granulares agitados, tanto en simulaciones computacionales como en experimentos (figura 1.5). La fase condensada observada en estos casos es mantenida no solamente por la presión ejercida por la fase gaseosa, sino por la misma inestabilidad de *clustering*, la cual se comporta de forma efectiva como una especie de «potencial atractivo a pares» de un sistema en equilibrio [33].

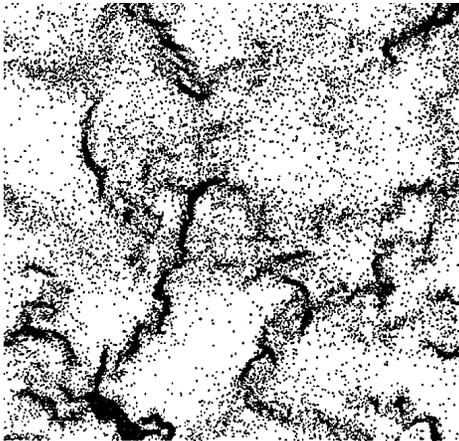


Figura 1.5: En esta figura se muestra un sistema granular en el que las partículas tienden a acumularse debido a la inestabilidad de *clustering*. Imagen tomada de Goldhirsch et al. [30].

### 1.2.3. Importancia del estudio de los materiales granulares

Los materiales granulares están involucrados en un gran número de procesos industriales y comerciales. La mayor parte de los alimentos se encuentran en forma granular, principalmente las semillas. Asimismo, los materiales utilizados en la industria de la construcción son materiales granulados: el cemento, la arena y la grava. El procesamiento de los materiales granulares consume aproximadamente un 10 % de la energía total producida en el mundo. Por esta razón, los materiales granulares son el tipo de materia más importante desde el punto de vista económico, solamente superados por el agua [31].

Los fenómenos no intuitivos mencionados anteriormente pueden generar una gran cantidad de problemas al momento de manejar o transportar los materiales granulares. Por ejemplo, en la industria farmacéutica, los fenómenos de segregación pueden provocar que un medicamento contenga una dosis menor o mayor a la indicada terapéuticamente, lo que podría tener consecuencias fatales. Por lo tanto, conocer la manera en que esta segregación se lleva a cabo es crucial para el correcto mezclado de sustancias presentes en forma granular.

### ***1.3. Objetivo de la tesis***

En este trabajo se reportará la atracción efectiva entre pares de partículas cilíndricas granulares moviéndose en un medio cuasibidimensional compuesto de esferas. Se demostrará que la atracción entre estos objetos se incrementa gracias a la inestabilidad de «clustering», la cual produce una cadena de esferas casi inmóviles sobre la superficie de los cilindros. Además, se demostrará la existencia de un potencial de largo alcance, diferente del potencial de depleción, no reportado hasta ahora en medios granulares cuasibidimensionales.

## Capítulo 2

### Experimentos

#### 2.1. Sistema experimental

El sistema experimental (Fig. 2.1) consiste de una mezcla granular compuesta por 50 rodillos de bronce y 2738 esferas de acero. Los rodillos fueron seleccionados de tal forma que todos tuvieran la misma longitud,  $L = 23.1$  mm, y un mismo diámetro,  $\sigma = 3.3$  mm. Todas las esferas tenían el mismo diámetro,  $\sigma$ , que los rodillos, con una polidispersidad menor al 1 %. Los valores de los coeficientes de restitución esfera-esfera y esfera-rodillo fueron, respectivamente,  $\epsilon_{ss} = 0.9$  y  $\epsilon_{sr} = 0.8$ , medidos a una velocidad relativa de 0.5 m/s [40].

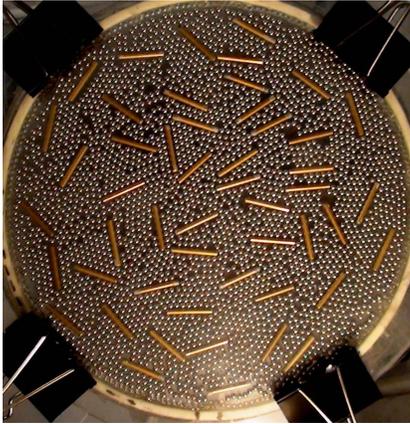


Figura 2.1: *Imagen del sistema experimental tomado desde arriba al comienzo del experimento.*

La mezcla fue colocada sobre una celda circular horizontal cuasibidimensional de diámetro  $D = 21$  cm y de 5 mm de alto ( $1.5\sigma$ ). Las paredes, el fondo de la celda y la tapa superior fueron hechas de Plexiglás. La celda se llenó a una fracción de empaquetamiento para esferas de  $\phi_s = N_s\sigma^2/D^2 = 67.6\%$  y una fracción de empaquetamiento para rodillos de  $\phi_r = N_rL\sigma/\pi(D/2)^2 = 11.0\%$ , donde  $N_s$  y  $N_r$  son el número total de esferas y rodillos, respectivamente.

Se montó la celda sobre un agitador modal alimentado con una señal sinusoidal de frecuencia fija de 60 Hz. En la mayor parte de los experimentos se alimentó al sistema para oscilar con una amplitud física de  $A = 0.17$  mm. Esta amplitud corresponde a una



Figura 2.2: Esferas incrustadas cerca de la orilla del sistema (en este caso con la celda vacía), para evitar efectos de borde.

aceleración adimensional  $\Gamma$  de 2.4, definida como

$$\Gamma = \frac{A(2\pi\nu)^2}{g},$$

con  $g$  la aceleración de la gravedad. Se escogió una frecuencia de 60 Hz, dado que el periodo de oscilación correspondiente a esta frecuencia, 16.7 ms, permite que el gas granular sea excitado antes de relajarse para formar agregados. Es decir, el periodo de oscilación es menor al tiempo promedio de relajación del gas. Este tiempo de relajación se puede obtener a partir de la tasa de energía inyectada y la tasa de pérdida de energía por la naturaleza inelástica del sistema [41], la cual, a su vez, se puede determinar a través del coeficiente de restitución de las esferas [42]. En nuestro caso, el tiempo de relajación no se obtiene directamente, sino que se exploraron diferentes frecuencias de oscilación hasta hallar aquella suficientemente alta en la que el sistema adquiere el estado estacionario claramente visible.

Con el fin de evitar efectos de borde, en la región cercana a las paredes se perforaron agujeros de diámetro ligeramente mayor a  $\sigma$  y dentro de ellos se encajaron esferas similares a las del gas granular hasta una profundidad de  $\sigma/2$  (Fig. 2.2). El propósito de esto fue evitar la acumulación de esferas y rodillos en las orillas, de modo que, si una partícula se acerca al borde, golpea a la esfera embebida con un ángulo tal que se le obliga a rebotar hacia el centro de la celda.

### 2.2. Medición de la dinámica lenta del sistema

La caracterización de la dinámica a tiempos largos se realizó grabando el sistema desde arriba con una cámara de video digital Sony DCR-SR200 a 30 cuadros por segundo. Se inició con una configuración de apariencia homogénea y se tomaron instantáneas cada 30 s para su análisis posterior.

Los agregados fueron identificados visualmente en cada fotografía. Se consideró como «agregado» a aquellas configuraciones en las que dos o más rodillos se tocan, ya sea paralela o perpendicularmente. En cada fotografía se midió manualmente el área excluida, tanto de los rodillos en agregación, como de aquellos que aún se encontraban libres. En este caso, el área excluida se considera como la proyección del zona alrededor de la superficie de los rodillos en donde el centro de una esfera no puede penetrar.

Otro tipo de agregados que se consideraron fueron aquellos consistentes en un par de rodillos atrapando una hilera casi inmóvil de esferas. Para este caso, se calculó el área excluida de toda la configuración, incluyendo a la hilera de esferas, como un solo objeto.

Después de sumar todas las áreas excluidas de los diferentes agregados, se definió un *área liberada* total del sistema,  $A_L(t)$  como el área excluida total inicial,  $A_T$ , cuando todos los rodillos están separados, menos el área excluida total en el tiempo de la instantánea considerada,  $A_{ex}(t)$  (Fig 2.3).

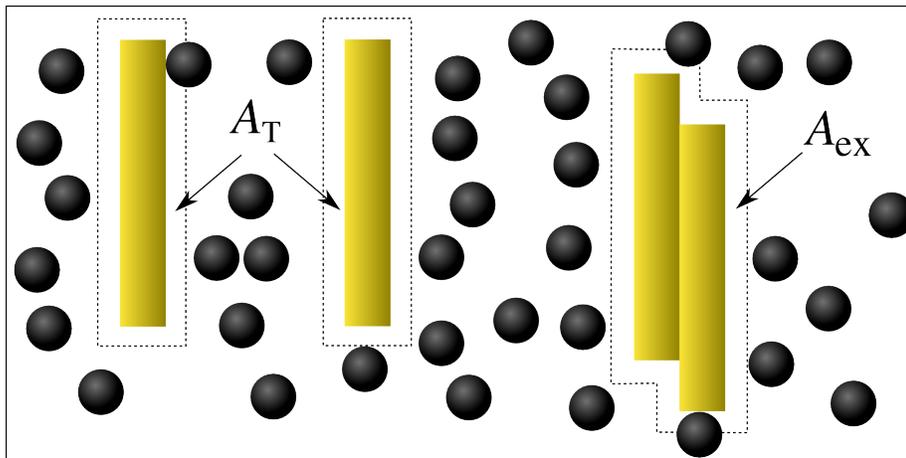


Figura 2.3: Cálculo del área excluida total inicial  $A_T$  y del área excluida en un tiempo determinado  $A_{ex}$ . El área liberada  $A_L$  se toma como la diferencia de estas dos:  $A_L = A_T - A_{ex}$ .

### 2.3. Medición de la dinámica rápida del sistema

Para caracterizar la dinámica a tiempos cortos, se utilizó una cámara de video de alta velocidad Red Lake Motion Meter grabando a una velocidad de 500 cuadros por segundo. Las esferas fueron identificadas a través de un macro creado con el *software* ImageJ, que consistió en ajustar el brillo y el contraste de cada cuadro y binarizarlo. Las esferas fueron identificadas gracias al reflejo de una fuente de luz lejana sobre su superficie, obteniendo así una lista con las posiciones de todas ellas. Dos listas consecutivas de posiciones fueron restadas, verificando cuidadosamente que las posiciones en un mismo renglón en ambas listas correspondieran a la misma esfera. Manualmente se eliminaron aquellas posiciones que el macro erróneamente confundía con las de otra esfera.

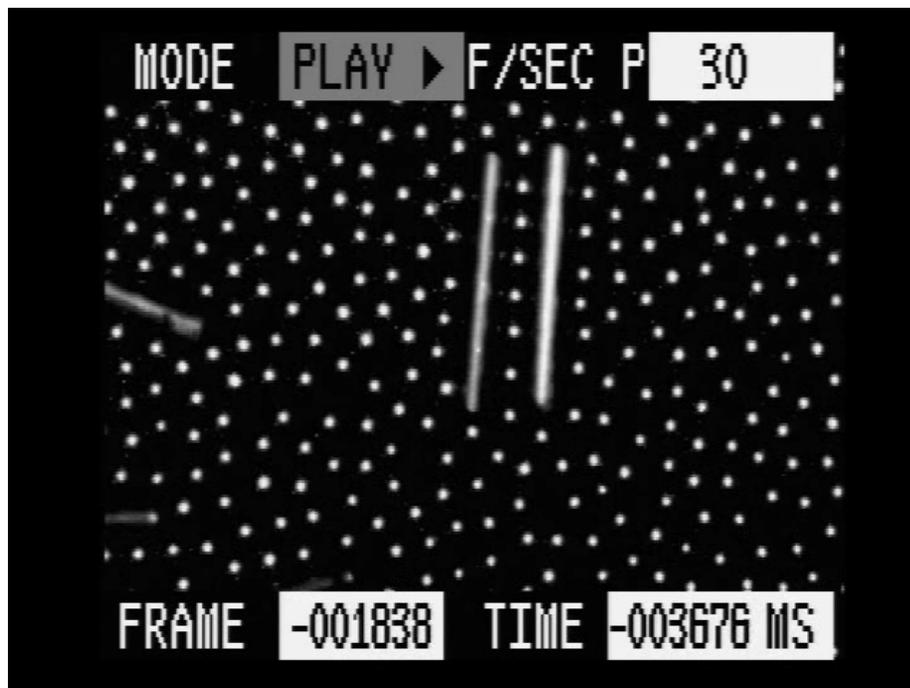


Figura 2.4: Fotograma obtenido con la cámara de alta velocidad mostrando un agregado que consiste en dos rodillos atrapando a una hilera de esferas.

Cada una de las imágenes obtenidas del video de alta velocidad tiene una resolución de 8.2 píxeles/mm; es decir, las posiciones medidas sobre las imágenes tienen una incertidumbre de 0.06 mm. En cada cuadro se podía identificar un promedio de 130 esferas. En total se analizaron 144 cuadros de video.

La grabación se realizó haciendo un acercamiento a la zona donde existiera un par de rodillos atrapando una hilera de esferas. De los fotogramas obtenidos y la lista de

posiciones para cada tiempo se obtuvieron las distribuciones de velocidades de las esferas dentro de estas configuraciones (en la hilera atrapada) así como las de aquellas que se encontraban fuera de la configuración. Las velocidades de las esferas se separaron además en componentes paralela y perpendicular definidas con respecto a los rodillos que formaban la configuración. Para ello se aplicó una rotación a la imagen, de tal manera que los rodillos quedaran en posición vertical, y de ahí se definió la componente perpendicular como aquella en dirección horizontal y la componente paralela como aquella en dirección vertical.

La orientación de los rodillos se determinó usando el reflejo lineal de una luz distante sobre éstos y ajustando a éste una elipse. Con ello se determinó la longitud y la posición de los ejes mayor y menor de dicha elipse. La incertidumbre en la orientación con este método es de menos de un grado.

#### **2.4. Mediciones de estabilidad de agregados**

Se midió separadamente la estabilidad de aquellos agregados que consisten de un par de rodillos atrapando una hilera de esferas. La forma de cuantificar la estabilidad fue a través de la medición de los tiempos de supervivencia de estos condensados como función de la aceleración  $\Gamma$ . Para esto se colocó como configuración inicial un par de rodillos con una hilera de esferas en medio y se cronometró el tiempo en que tardan en deshacerse. Para este caso, se llenó la celda a una fracción de empaquetamiento de 68 %, sin ningún rodillo salvo el par que forma la configuración. La aceleración se incrementó aumentando la amplitud de oscilación  $A$  y manteniendo constante la frecuencia, dada la respuesta no lineal del agitador a diferentes frecuencias. Se realizaron veinte mediciones para cada valor de amplitud.

El criterio para considerar como rota la configuración fue cuando la distancia perpendicular entre dos extremos cercanos de los rodillos excede  $3\sigma$  (es decir, en estos extremos caben dos esferas). En otras palabras, la configuración pierde su asociación cuando los rodillos forman entre sí un ángulo mayor a  $5^\circ$ .

Aunque en el transcurso del experimento no era extraño observar agregados atrapando dos hileras de esferas, no se consideró estudiar la estabilidad de estas configuraciones dado que eran mucho menos frecuentes que las de una hilera sencilla.

#### **2.5. Medición del potencial efectivo a pares**

Otro objetivo de este trabajo fue el de obtener una medición directa del potencial efectivo de largo alcance entre dos rodillos paralelos. Para esto se modificó la celda colocando una varilla fija al suelo de ésta (Fig. 2.5). La varilla fija poseyó el mismo diámetro de los rodillos mencionados en secciones anteriores pero una longitud que abarcó de orilla a orilla a través de la celda. El sistema fue llenado a una fracción de empaquetamiento de esferas del 55 %. Se colocó además un único rodillo que en este caso tenía una longitud de 5.0 cm.

El experimento se realizó a una aceleración adimensional  $\Gamma = 2.0$  colocando el rodillo libre en diferentes posiciones iniciales, desde  $1\sigma$ , aumentando cada vez  $1\sigma$  su posición hasta llegar a  $20\sigma$  tomando como cero la superficie más cercana del rodillo fijo



Figura 2.5: Configuración experimental para obtener el potencial efectivo entre dos rodillos, uno fijo y otro móvil.

al rodillo móvil. El rodillo comenzó a moverse libremente en el fluido y se le tomaron fotografías cada 5 s, para registrar posteriormente su posición con respecto al rodillo fijo. Para cada posición inicial, se dejó correr el experimento durante 15 min. Si el rodillo móvil rotaba hasta formar un ángulo mayor a  $10^\circ$ , el experimento se interrumpía y se le volvía a colocar de forma paralela al rodillo fijo en la misma posición donde se encontraba al momento de la interrupción.

Los fotogramas obtenidos se analizaron por medio de un macro de ImageJ, similar a lo explicado en secciones anteriores, y se obtuvo una lista de posiciones. Posteriormente, estas posiciones fueron graficadas en forma de histograma para obtener una función de distribución con ellas.

## Capítulo 3

### Simulaciones

Dadas las complicaciones para obtener un potencial a partir de la poca estadística obtenida a partir de los datos experimentales (véase Sec. 2.5), se creó un código escrito en lenguaje C para simular el mismo experimento. La simulación se realizó utilizando dinámica molecular con un algoritmo Verlet modificado con predicción de velocidad [43].

#### 3.1. Descripción del sistema numérico

El sistema simulado consiste de partículas esféricas de diámetro  $\sigma$  finito dentro de una caja de dimensiones  $L_x \times L_y \times h$  con paredes rígidas en los planos  $z = 0$ ,  $z = h$ ,  $y = 0$  y  $y = L_y$ . En la dirección  $x$ , el sistema tiene condiciones periódicas de frontera, de modo que, si una partícula llega a una posición  $x = L_y$  moviéndose en dirección positiva de  $x$  o a la posición  $x = 0$  moviéndose en dirección negativa «aparece» en el otro lado. Además de las partículas esféricas, el sistema tiene un esferocilindro de diámetro  $\sigma$  y de longitud  $\ell$  (véase Fig. 3.1).

La interacción entre partículas y partícula-pared se calcula utilizando un modelo *spring-dashpot* para las fuerzas normales [44] y para las fuerzas tangenciales —de fricción— se utiliza un modelo de Coulomb. Todas las partículas tienen permitido moverse con tres grados de libertad traslacionales y tres grados de libertad rotacionales. El algoritmo permite modificar los parámetros iniciales del sistema: el número de esferas ( $N_s$ ) el diámetro de las esferas y el esferocilindro ( $\sigma$ ), la longitud del esferocilindro ( $\ell$ ), los coeficientes de restitución esfera-esfera ( $\epsilon_{ss}$ ), esfera-esferocilindro ( $\epsilon_{sr}$ ), esfera-pared ( $\epsilon_{sw}$ ) y esferocilindro-pared ( $\epsilon_{rw}$ ); los coeficientes de fricción esfera-esfera ( $\mu_{ss}$ ), esfera-esferocilindro ( $\mu_{sr}$ ), esfera-pared ( $\mu_{sw}$ ) y esferocilindro-pared ( $\mu_{rw}$ ); las densidades de las esferas ( $\rho_s$ ), del esferocilindro ( $\rho_r$ ) y de las paredes ( $\rho_w$ ); la velocidad inicial de las partículas,  $v_0$ ; la amplitud de oscilación de la celda,  $A$ ; y su frecuencia de oscilación,  $\nu$ .

La simulación comienza colocando aleatoriamente las esferas en espacios sobre un arreglo hexagonal ubicados a distancias de  $1.05\sigma$ . En seguida se coloca el esferocilindro en una orientación paralela al eje  $x$  y en una posición  $(L_x/2, y_0, h/2)$ , donde la posición  $y_0$  se va incrementando de la misma manera que en el experimento explicado en la Sec. 2.5. Si el esferocilindro se superpone a algunas de las esferas ya existentes, estas últimas son eliminadas. Se les da a las partículas una velocidad inicial  $\mathbf{v} = v_0(\cos \tilde{\theta}, \sin \tilde{\theta}, 0)$ , donde  $\tilde{\theta}$  es una variable aleatoria que tiene valores entre  $-\pi$  y  $\pi$ .

En todo tiempo  $t$  las partículas están sujetas a una aceleración constante  $-g$  en la dirección de  $z$ . Al mismo tiempo, las paredes oscilan armónicamente en la dirección

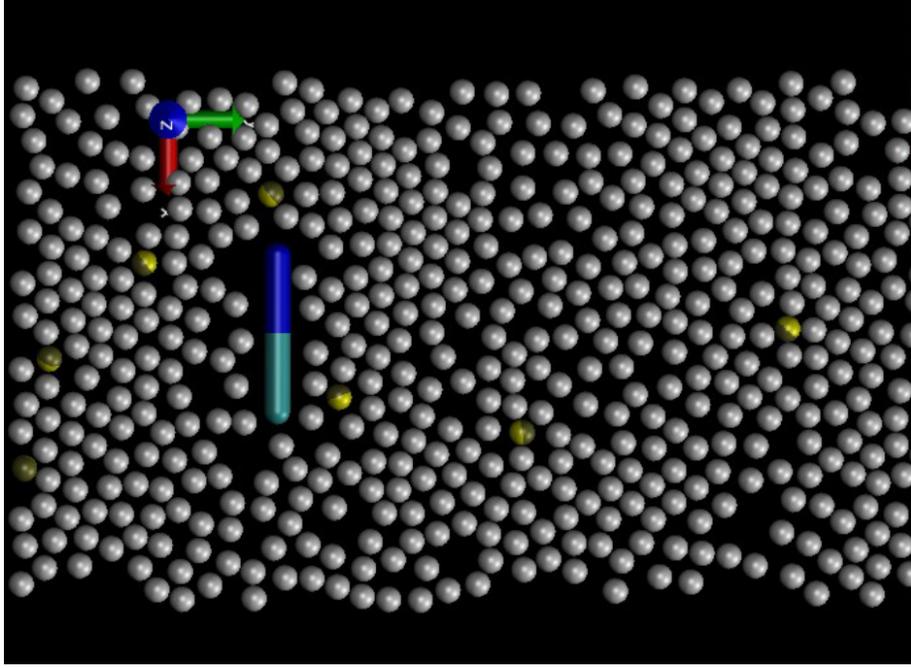


Figura 3.1: Representación del sistema simulacional obtenida con el visualizador VMD. En esta representación el eje  $x$  (rojo) crece hacia abajo, el eje  $y$  (verde) crece hacia la derecha y el eje  $z$  crece hacia afuera del plano del papel.

vertical de acuerdo a la ecuación

$$z_w(t) = A \text{sen}(2\pi\nu t).$$

Con el fin de evitar la supresión de la velocidad horizontal debida a la pérdida de energía rotacional por la fricción con el suelo y el techo [46], se le añadió una «rugosidad» a estas superficies. En vez de tratarse de planos perfectamente lisos, se definieron dichas superficies de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$z(x, y) = \varphi(\text{sen } \psi x + \text{sen } \psi y),$$

con  $\varphi = 10^{-3}\sigma$  y  $\psi = 210/\sigma$ . De esta manera, la longitud de separación entre las «arrugas» es mucho menor que un diámetro de partícula.

Para evitar que el esferocilindro perdiera el paralelismo con respecto al eje  $x$ , se le añadió una torca proporcional a su desplazamiento angular alrededor de  $z$ :

$$\tau_z = -k\theta_z.$$

De esta manera se obligó al esferocilindro a regresar a su orientación original sin que perdiera su grado de libertad rotacional alrededor del eje  $z$ .

El programa contenía la instrucción para guardar en un archivo la posición y del esferocilindro cada cierto tiempo. En cada corrida se colocó al esferocilindro en posiciones que fueron aumentando en intervalos de  $\sigma/2$ , desde  $3\sigma$  hasta  $23\sigma$ . Se dejó correr el programa para simular un tiempo real de 120 s. Del archivo de datos de posición, se obtuvo un histograma de posiciones y de ahí una función de distribución  $g(y)$ , de la que posteriormente se extrajo el potencial de interacción entre la pared ubicada en  $y = 0$  y el esferocilindro.

Se realizaron diferentes corridas cambiando los coeficientes de restitución  $\epsilon_{sr}$ , de fricción  $\mu_{sr}$ , la fracción de llenado  $\phi_s$  y la aceleración adimensional  $\Gamma$ .

### 3.2. Cálculo de fuerzas

El algoritmo de Verlet requiere que se conozca el valor de la aceleración total  $a$  *a priori* para poder efectuarse. Para ello se calcula primeramente las fuerzas totales (modelo *spring-dashpot*, fricción de Coulomb y la gravedad) y los torques totales. Cuando dos objetos colisionan es necesario tomar en cuenta conjuntamente las fuerzas y torques, dependiendo del punto de contacto entre ellos. A continuación se detalla el procedimiento realizado para dicho cálculo.

Ubicamos las posiciones del centro de masa del cuerpo  $a$  y el cuerpo  $b$  (Fig. 3.2), que son, respectivamente,  $\mathbf{r}_a$  y  $\mathbf{r}_b$ . Ubicamos la posición del punto de contacto,  $\mathbf{r}_c$ . Dado que los cuerpos se mueven con velocidades del centro de masa,  $\mathbf{v}_a$  y  $\mathbf{v}_b$ , y  $\boldsymbol{\omega}_a$  y  $\boldsymbol{\omega}_b$ , respectivamente, la velocidad del punto de contacto en la superficie del cuerpo  $a$  y en la superficie del cuerpo  $b$  está dada para cada caso por

$$\mathbf{v}_c^{(a)} = \mathbf{v}_a + \boldsymbol{\omega}_a \times (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_a),$$

$$\mathbf{v}_c^{(b)} = \mathbf{v}_b + \boldsymbol{\omega}_b \times (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b).$$

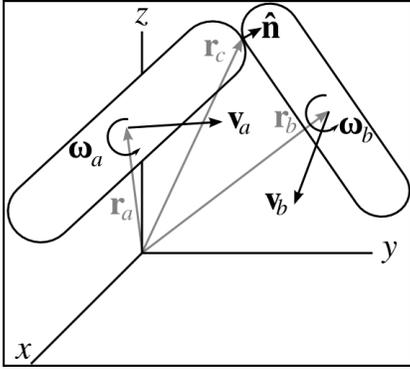


Figura 3.2: Dos cuerpos,  $a$  y  $b$ , colisionando y moviéndose a velocidades  $\mathbf{v}_a$  y  $\mathbf{v}_b$ , y girando a velocidades angulares  $\boldsymbol{\omega}_a$  y  $\boldsymbol{\omega}_b$ , respectivamente. El centro de masa de los cuerpos se ubica en las posiciones  $\mathbf{r}_a$  y  $\mathbf{r}_b$ . El punto de contacto está ubicado en la posición  $\mathbf{r}_c$ . De este punto en la superficie sale un vector normal unitario  $\hat{\mathbf{n}}$ .

La velocidad relativa de los puntos de contacto en la superficie de  $a$  con respecto a la del punto de contacto en  $b$  está dada por

$$\Delta \mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c^{(a)} - \mathbf{v}_c^{(b)}.$$

Esta velocidad relativa se descompone en una parte normal y una parte tangencial, dadas respectivamente por

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{v}_c^{(n)} &= (\Delta \mathbf{v}_c \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}, \\ \Delta \mathbf{v}_c^{(t)} &= \Delta \mathbf{v}_c - \Delta \mathbf{v}_c^{(n)},\end{aligned}$$

donde  $\hat{\mathbf{n}}$  es un vector unitario normal a la superficie del cuerpo  $a$ . La tasa de compresión de los cuerpos,  $\dot{\xi}$ , se obtiene a través de

$$\dot{\xi} = -\Delta \mathbf{v}_c \cdot \hat{\mathbf{n}}.$$

De esta expresión, y considerando que la compresión  $\xi$  es la distancia de compenetración de los dos cuerpos, se puede calcular la fuerza normal sentida por los cuerpos en el punto de contacto con el modelo *spring-dashpot*:

$$\mathbf{f}_n = -(\kappa\xi - \gamma\dot{\xi})\hat{\mathbf{n}},$$

donde  $\kappa$  y  $\gamma$  son la constante de resorte y la constante de amortiguamiento, respectivamente.

Para la fuerza de fricción es necesario tomar en cuenta que ésta es cero cuando la velocidad tangencial es cero. Sin embargo, debido a las limitaciones numéricas, puede ocurrir que, en un intervalo  $\Delta t$  muy pequeño, la velocidad tangencial cambie de signo cuando su magnitud es muy cercana a cero. Si  $\Delta t$  es mas pequeño que el paso de simulación, el algoritmo no detectaría un valor de cero en la velocidad tangencial, por lo que continuaría calculando una fuerza de fricción no nula, y esto se traduciría en un comportamiento oscilatorio muy pequeño. Para evitar esto, se realiza lo siguiente: definimos las constantes

$$\beta = \frac{\mu|\mathbf{f}_n|}{|\Delta \mathbf{v}_c^{(t)}|}, \quad t_0 = \frac{m_b}{\beta}, \quad \beta' = \frac{\beta}{1 + \left(\frac{\Delta t}{t_0}\right)^2},$$

donde  $\mu$  es el coeficiente de fricción y  $m_b$  la masa del cuerpo  $b$ . Con esto, la fuerza de fricción se calcula como

$$\mathbf{f}_f = \beta' \Delta \mathbf{v}_c^{(t)}.$$

Con el valor de las fuerzas normal y de fricción, el torque sobre cada uno de los cuerpos está dado respectivamente por:

$$\boldsymbol{\tau}^{(a)} = (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_a) \times (\mathbf{f}_n + \mathbf{f}_f),$$

$$\boldsymbol{\tau}^{(b)} = (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b) \times (\mathbf{f}_n + \mathbf{f}_f).$$

Cuando un cuerpo gira sobre la superficie del otro, la fuerza de fricción provoca una disminución de su momento angular. Este torque debido a la fricción se calcula de manera similar a la fuerza de fricción. Definimos las constantes

$$\beta_\tau = \frac{\mu|\mathbf{f}_n|\sigma_{\text{eff}}}{|\Delta \boldsymbol{\omega}|}, \quad t_{\tau,0} = \frac{I_b}{\beta_\tau}, \quad \beta'_\tau = \frac{\beta_\tau}{1 + \left(\frac{\Delta t}{t_{\tau,0}}\right)^2},$$

donde  $\sigma_{\text{eff}}$  es un diámetro efectivo que, para esta simulación se definió en términos del diámetro de partícula,  $\sigma$ , como  $\sigma_{\text{eff}} = \sigma/1000$ ;  $I_b$  es el momento angular del cuerpo  $b$  alrededor del eje de rotación sobre el punto de contacto y  $\Delta\boldsymbol{\omega}$  es la diferencia de velocidades angulares entre los dos cuerpos:

$$\Delta\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_b - \boldsymbol{\omega}_a.$$

Con lo anterior, el torque debido a la fricción queda determinado a través de la expresión

$$\boldsymbol{\tau}_f = \beta'_\tau |\Delta\boldsymbol{\omega}| \hat{\mathbf{n}}.$$



## Capítulo 4

### Marco teórico

#### 4.1. Función de distribución y potencial de fuerza media

En un sistema de partículas, podemos cuantificar las variaciones de la densidad como función de la distancia medida desde una partícula de referencia a través de la llamada «función de distribución radial», la cual se representa como  $g(r)$ , donde  $r$  es la distancia. La función  $g(r)$  indica qué tan probable es hallar una partícula a una distancia  $r$  de otra [47].

La forma más directa de obtener la función de distribución radial de un sistema de partículas es midiendo las distancias entre todos los pares de partículas existentes y graficarlas en forma de histograma con un tamaño de *bin*  $dr$ . Este histograma se debe normalizar con respecto a una distribución constante (como sería el caso de un gas ideal).

En la figura 4.1(a) se muestra un sistema de partículas en donde, tomando como referencia la partícula roja del centro, se cuenta el número de partículas grises que se encuentran a una distancia  $r$  de ella. Haciendo lo mismo para todas las partículas del sistema se obtiene la función  $g(r)$ , que es la curva verde en la figura 4.1b. Las líneas punteadas en (a) representan las capas de coordinación, es decir, las distancias de máxima probabilidad de encontrar una partícula. Esto se refleja como los máximos en la función de distribución en (b). Conforme la distancia  $r$  aumenta, se va perdiendo la correlación entre las partículas y la función  $g(r)$  va tendiendo a 1. Esto significa que la densidad como función de  $r$  tiende a la densidad de bulto para distancias grandes. En esta figura,  $\sigma$  es el diámetro de partícula.

Se puede demostrar [47] que la función de distribución radial está relacionada con el cambio en la energía libre de Helmholtz cuando dos partículas son traídas desde el infinito hasta una separación  $r$  a través del llamado «teorema del trabajo reversible». Este cambio en la energía libre de Helmholtz, denotado como  $w(r)$  es conocido habitualmente como «potencial de fuerza media» y está relacionado con la función de distribución radial a través de la ecuación

$$g(r) = \exp\left[-\frac{w(r)}{kT}\right], \quad (4.1)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura del medio.

Cuando existe un potencial de interacción,  $U(r)$ , entre las partículas del sistema, la relación entre este potencial y la función de distribución radial no se puede obtener directamente, ya que requiere la resolución de una ecuación integral conocida como ecuación de Ornstein-Zernike. Esta ecuación toma en cuenta la interacción directa entre

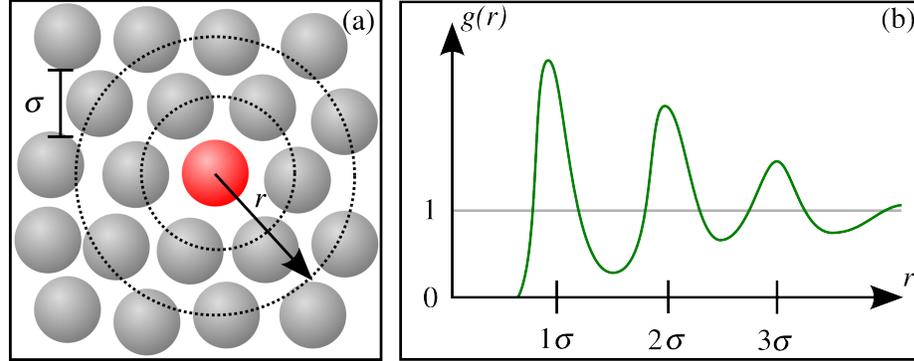


Figura 4.1: (a) La función  $g(r)$  se obtiene contando el número de partículas halladas a una distancia  $r$  desde el centro de una partícula de referencia para cada distancia  $r + dr$ . Este procedimiento se repite para todas las partículas y se obtiene un histograma (b). Los máximos de esta función son corresponden a las distancias de máxima probabilidad de encontrar una partícula.

pares de partículas y la interacción indirecta a través de terceras partículas. No obstante, cuando los medios están lo suficientemente diluidos, la interacción entre partículas se puede aproximar como  $w(r)$  y la relación entre  $g(r)$  y  $U(r)$  es la ecuación (4.1), cambiando  $w(r)$  por  $U(r)$ . La relación es exacta si tomamos en cuenta únicamente un solo par de partículas, lo cual será el caso en las secciones siguientes.

#### 4.2. Potencial efectivo entre dos rodillos

Un sistema granular cuasibidimensional de  $N$  esferas de masa  $m$ , que se encuentra sujeto a una oscilación armónica en la dirección vertical  $z$  con frecuencia  $\nu = \omega/2\pi$  y amplitud  $A$ , determinada por la ecuación  $z(t) = A \cos(\omega t)$ , adquiere una energía máxima de las oscilaciones que es

$$E_{\text{máx}} = \frac{1}{2}Nm \left( \frac{dz(t)}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2}NmA^2\omega^2.$$

Esta energía se reparte en seis grados de libertad para cada grano: tres rotacionales y tres traslacionales. Si suponemos que la energía se reparte a equitativamente a cada grado de libertad, la energía máxima está expresada en términos de la «temperatura» granular como  $E_{\text{máx}} = 3NkT$ .

Experimentalmente, solo es medible la energía traslacional en las direcciones horizontales del sistema; es decir, solo son accesibles dos grados de libertad. A estos les corresponde una energía «térmica» dada por

$$\frac{1}{2}Nm\langle v^2 \rangle = NkT,$$

donde  $\langle v^2 \rangle$  es la velocidad cuadrática media medida —es decir, solamente las componentes horizontales de la velocidad—. Por lo tanto, la energía máxima por partícula adquirida por el sistema granular debida a la agitación vertical  $z(t)$  se puede expresar como

$$E_{\text{máx}} = \frac{3}{2}m\langle v^2 \rangle.$$

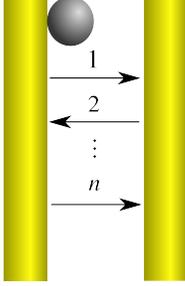


Figura 4.2: Una esfera atrapada entre dos rodillos separados una distancia y efectúa una sucesión de  $1, 2, \dots, n$  trayectorias, donde después de cada colisión pierde una cantidad de energía proporcional a  $\epsilon^2$ .

Supongamos una esfera atrapada entre dos rodillos separados una distancia y que efectúan una serie de  $n$  colisiones contra ellos (Fig.4.2). La esfera se mueve desde la superficie del primer rodillo hasta la superficie del segundo, colisionando contra él. En la colisión la esfera pierde una cierta cantidad de energía determinada por el coeficiente de restitución  $\epsilon$ . Si la energía antes de la colisión es  $E_1$  y después de esta es  $E_2$ , la relación entre ambas energías está dada por

$$E_2 = \epsilon^2 E_1.$$

Con la colisión, la dirección de movimiento en la dirección perpendicular al rodillo se invierte, y ahora la esfera se mueve hacia el primero sufriendo una segunda colisión. La energía después de la segunda colisión será

$$E_3 = \epsilon^2 E_2 = \epsilon^4 E_1.$$

Esto se repetirá  $n$  veces. Al final de  $n$  colisiones, la energía estará dada por

$$E_n = \epsilon^{2(n-1)} E_1.$$

De lo anterior, la energía perdida en todo el proceso de las  $n$  colisiones estará dada por

$$\Delta E_{1 \rightarrow n} = \left[ 1 - \epsilon^{2(n-1)} \right] \frac{3}{2} m \langle v^2 \rangle. \quad (4.2)$$

Aquí se está suponiendo que la energía inicial  $E_1$  es igual a la energía máxima transferida por la oscilación vertical a las partículas del granulado.

El tiempo invertido por la esfera en recorrer la trayectoria 1 de la Fig. 4.2 está dado por la distancia y dividida entre la velocidad inicial  $v_1$ . Después de la primera colisión, la velocidad de la esfera cambia de dirección y disminuye proporcionalmente al coeficiente de restitución. La velocidad después de este choque es  $v_2 = \epsilon v_1$ , y el tiempo

necesario para recorrer la trayectoria 2 es  $y/v_2$ . Asimismo, después de una segunda colisión, la velocidad resultante será  $v_3 = \epsilon v_2 = \epsilon^2 v_1$ , y el tiempo para recorrer la trayectoria 3 será  $y/v_3$ , etc. Finalmente, la velocidad  $v_n$ , después de  $n - 1$  colisiones, suponiendo que la velocidad inicial está dada por la energía cinética adquirida de la energía  $E_{\text{máx}}$ , estará dada por

$$v_n = \epsilon^{n-1} \langle v^2 \rangle^{1/2}.$$

El tiempo correspondiente a la trayectoria  $n$  es  $y/v_n$ . El tiempo total que necesita la esfera para efectuar las  $n$  trayectorias es la suma de todos los tiempos anteriores, es decir

$$\Delta t_{1 \rightarrow n} = \sum_{i=1}^n \frac{y}{v_i} = \sum_{i=1}^n \frac{y}{\epsilon^{i-1} \langle v^2 \rangle^{1/2}}.$$

Teniendo la energía perdida durante el proceso de  $n$  colisiones, Ec. (4.2), y el tiempo que este proceso tarda, podemos obtener la potencia transferida de la esfera al rodillo:

$$P_{1 \rightarrow n} = \frac{\Delta E_{1 \rightarrow n}}{\Delta t_{1 \rightarrow n}} = \frac{\frac{3}{2} m \langle v^2 \rangle^{3/2} [1 - \epsilon^{2(n-1)}]}{y \sum_{i=1}^n \epsilon^{1-i}}. \quad (4.3)$$

De la potencia transferida es posible hallar la fuerza sentida por el rodillo debida a las colisiones dividiendo la potencia entre la velocidad adquirida por el rodillo. O sea,

$$F_{1 \rightarrow n} = \frac{P_{1 \rightarrow n}}{v_r} = \frac{3m \langle v \rangle^{3/2} [1 - \epsilon^{2(n-1)}]}{2v_r \sum_{i=1}^n \epsilon^{1-i}} \frac{1}{y}.$$

En la ecuación anterior, la primera fracción es una función exclusivamente de la temperatura granular y del coeficiente de restitución, que se puede escribir como

$$W(kT, \epsilon) = \frac{3m \langle v \rangle^{3/2} [1 - \epsilon^{2(n-1)}]}{2v_r \sum_{i=1}^n \epsilon^{1-i}}.$$

Además de la fuerza ejercida por la esfera, los rodillos sienten una fuerza debida a la presión de las esferas en el exterior. Si dicha fuerza es  $F_0$ , se puede obtener una expresión para la fuerza sentida por los rodillos como función de su separación  $y$ . Esto es

$$F(y) = \frac{1}{y} W(kT, \epsilon) - F_0. \quad (4.4)$$

A partir de la ecuación anterior, se puede obtener un potencial de interacción integrando con respecto a  $y$ . Esto resulta

$$U(y) = F_0 - W(kT, \epsilon) \ln y. \quad (4.5)$$

La función de distribución de separaciones es  $g(y) = \exp[-U(y)/kT]$ , es decir,

$$g(y) = y^{W(kT, \epsilon)/kT} e^{-F_0 y/kT} \quad (4.6)$$

Esta función de distribución es un forma general. Posteriormente se ajustará esta función a datos numéricos dejando como parámetros libres las variables  $W(kT, \epsilon)/kT$  y  $F_0/kT$ .

### 4.3. Cálculo del camino libre medio en un gas granular bidimensional

En general, el camino libre medio en un gas compuesto de partículas de diámetro  $D$  y cuyo número de partículas por unidad de área, o volumen es  $n$ , se puede calcular con la expresión

$$l_{\text{MFP}} = \frac{1}{n\sigma}, \quad (4.7)$$

donde  $\sigma$  es la sección eficaz de las partículas. Para el caso bidimensional, las partículas tienen una sección eficaz  $\sigma = 2D$ .

En un tiempo  $t$ , las partículas recorren una distancia  $L = \langle v \rangle t$ , donde  $\langle v \rangle$  es la velocidad. Durante ese tiempo ocurrirán  $N$  colisiones. Por otro lado, la partícula barrerá un área  $A = \sigma \langle v \rangle t$  durante ese tiempo. De ahí se puede calcular el número de colisiones como

$$N = nA = n\sigma \langle v \rangle t = 2nD \langle v \rangle t. \quad (4.8)$$

El camino libre medio es la distancia recorrida entre una colisión y la siguiente. Si en la distancia  $L$  ocurren  $N$  colisiones, entonces el camino libre medio debe ser  $L/N$ . Por lo tanto,

$$l_{\text{MFP}} = \frac{\langle v \rangle t}{2nD \langle v_{\text{rel}} \rangle t} = \frac{1}{2\sqrt{2}nD}, \quad (4.9)$$

donde  $\langle v_{\text{rel}} \rangle = \sqrt{2} \langle v \rangle$  es la velocidad relativa promedio entre las partículas.

Por último, la fracción de llenado es la razón del área ocupada por las partículas a el área total disponible. Es decir

$$\phi = \frac{\pi(D^2/4)\mathcal{N}}{\mathcal{A}}, \quad (4.10)$$

donde  $\mathcal{N}$  es el número total de partículas y  $\mathcal{A}$  es el área total. Pero  $\mathcal{N}/\mathcal{A}$  es precisamente  $n$ . Por lo tanto,

$$\phi = \frac{\pi D^2 n}{4} \quad (4.11)$$

Si despejamos  $n$  y la sustituimos en la ec. (4.9), obtenemos finalmente que el camino libre medio es

$$l_{\text{MFP}} = \frac{\pi D}{8\sqrt{2}\phi}. \quad (4.12)$$



## Capítulo 5

### Resultados y discusión

#### 5.1. Experimentos con varios rodillos

La mezcla granular evoluciona desde su configuración inicial establecida manualmente y con apariencia homogénea a una configuración donde aparecen islas de agregados de rodillos que se tocan lateralmente. Estos agregados forman dímeros, trímeros, etc. En la Fig. 5.1 se muestra la configuración inicial (a), una intermedia después de 15 min (b) y la configuración final después de 30 min (c).

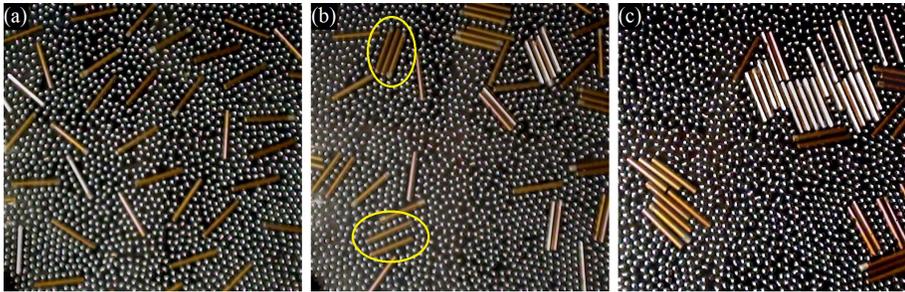


Figura 5.1: Evolución del sistema desde su configuración inicial (a), a los 15 min (b) y su configuración final a los 30 min (c).

En la Fig. 5.1b puede verse que el sistema sufre una separación de fases y que se forman varios agregados después del inicio del experimento. Las dos nuevas fases que se forman están constituidas por un gas de esferas con unos pocos rodillos diluidos en él y por varias islas de agregados formados por rodillos paralelos. Estos agregados pueden consistir en dos, tres o más rodillos paralelos en contacto directo, o en dos rodillos paralelos atrapando una cadena (en algunas ocasiones dos o más cadenas, aunque esto es mucho menos común) de esferas casi inmóviles entre estos dos. En la figura se muestra, dentro de un óvalo amarillo, un ejemplo representativo de cada uno de estos dos tipos de condensados.

Llamaremos a los agregados que consisten en dos o más rodillos tocándose lateralmente «agregados por depleción directa» (abreviado como DDA, por sus siglas en inglés) y a los agregados que consisten en dos rodillos atrapando una cadena de esferas «agregados por depleción indirecta» (abreviado como IDA) [48]. La principal diferencia entre estos dos tipos de agregados radica en si la región entre dos rodillos sucesivos está vacía o no de esferas (véase la Fig. 5.2).

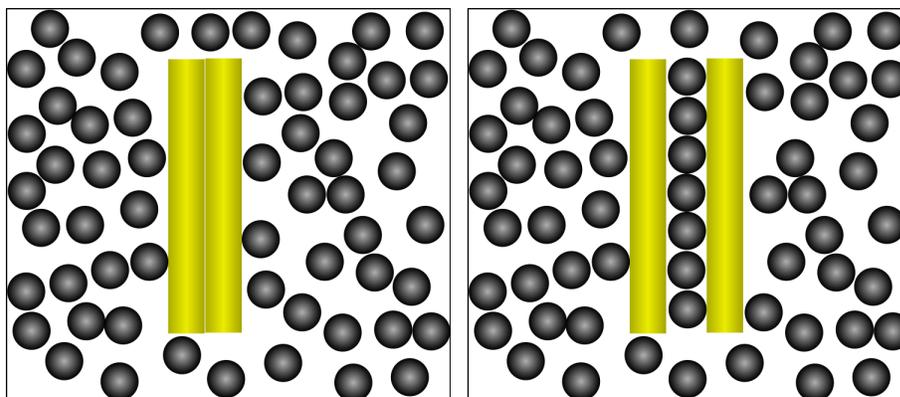


Figura 5.2: En el lado izquierdo se muestra un ejemplo de un agregado por depleción directa (DDA). En el lado derecho se muestra un ejemplo de agregado por depleción indirecta (IDA) [48].

La fuerza que provoca la formación de dímeros de DDA es la fuerza de depleción. Esto ya ha sido demostrado en trabajos previos experimentales en medios granulares tridimensionales compuestos por rodillos y esferas, así como en simulaciones de Monte Carlo en medios bidimensionales [11]. La interacción aparece como resultado del hecho de que, si dos rodillos se encuentran lateralmente, la región entre ellos se encuentra libre de esferas y, por lo tanto, no hay una transferencia de momento lineal hacia los rodillos desde esta región interna. Al mismo tiempo, las esferas en el exterior ejercen presión sobre los rodillos, lo que los empuja uno contra el otro.

En el caso de los agregados de IDA, cuando una línea de esferas se queda atrapada por casualidad entre un par de rodillos paralelos, la disipación de energía debida a las colisiones inelásticas y la fricción provoca que las esferas pierdan movilidad dentro de esta configuración. Aunque la región entre los rodillos no está vacía de esferas, un análisis más detallado revela que la densidad numérica es siempre mayor en el interior ( $n_i = 9.5$  partículas/cm<sup>2</sup>) que en el exterior ( $n_o = 7.7$  partículas/cm<sup>2</sup>). Esto debería de conducir, en principio, a una presión «osmótica» mayor en el interior de la configuración de IDA, lo que produciría una fuerza efectiva que separaría a los rodillos. A su vez, esto debería observarse como una configuración inestable. Por el contrario, estas estructuras aparecen con mucha frecuencia y son lo suficientemente estables para permanecer en estado estacionario durante decenas de segundos, una vez que se forman cuando se encuentran aisladas. Incluso son capaces de permanecer durante todo el experimento si quedan atrapadas entre estructuras de DDA. Esta gran estabilidad indica una significativa atracción entre los rodillos dentro de un medio tan fuertemente fluctuante.

El mecanismo detrás de la estabilidad de las configuraciones de IDA se puede revelar estudiando la distribución de velocidades de las esferas, tanto dentro como fuera de dichas estructuras. En la Fig. 5.3 se muestra de forma comparativa la distribución de

velocidades para partículas atrapadas entre rodillos y para partículas del gas que rodea a la configuración. Para este último caso se consideran todas aquellas partículas en el campo de visión, incluyendo a aquellas cercanas a los rodillos, pero excluyendo a las internas. La razón para incluir a estas esferas es que, aunque las esferas que se encuentran más cercanas a los rodillos tienen una velocidad menor, estas últimas actúan como transmisoras de momento lineal desde las esferas que están situadas en el bulto.

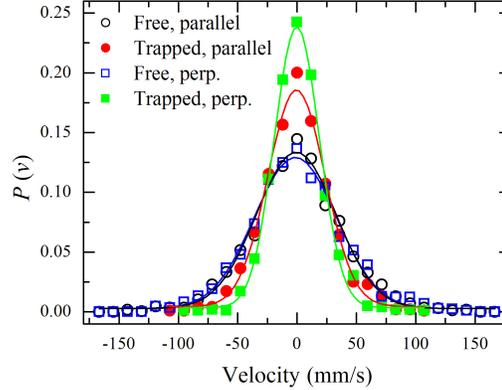


Figura 5.3: Distribución de velocidades para las componentes paralela (círculos) y perpendicular (cuadrados) de esferas atrapadas en una configuración de IDA (símbolos sólidos) y esferas libres (símbolos huecos).

El análisis de la distribución de velocidades en la Fig. 5.3 revela una clara supresión de la componente perpendicular del movimiento de las partículas atrapadas en el condensado de IDA. Las esferas en el interior tienen menos probabilidad de adquirir momento lineal en la dirección perpendicular a los rodillos que las confinan y únicamente reciben momento del plato oscilante en la dirección vertical y a lo largo de los rodillos, debido a la restricción impuesta por estos.

La inhibición mecánica de la adquisición de momento perpendicular a los rodillos se debe al hecho de que las esferas que en algún instante se encuentran atrapadas entre ellos sufren un mayor número de colisiones por unidad de tiempo contra los rodillos. Los rodillos pueden considerarse como objetos inmóviles, debido a que es necesario que ocurra una fluctuación grande en la densidad de esferas para que estos tengan un desplazamiento significativo (su velocidad promedio medida directamente en el experimento fue de  $v_r = 11 \pm 4.5$  mm/s), comparado con el desplazamiento de las esferas (para las cuales se midieron velocidades promedio del orden de 50 mm/s).

El fenómeno de inhibición de movimiento debido a un confinamiento fue demostrado por Golhirsch [30], quien lo llamó «inestabilidad de *clustering*». Este fenómeno está fuertemente relacionado con el llamado *colapso inelástico*, descubierto previamente *in silico* por Shida y Kawai [35]. Este efecto de *clustering* no puede ser medido directamente en los experimentos, debido a las limitaciones tanto espaciales como temporales, ya que el número de colisiones por unidad de tiempo aumenta considerablemente conforme los rodillos se acercan uno al otro. No obstante, al medir la distancia promedio entre un rodillo y el otro, se puede inferir fácilmente el desplazamiento perpendicular promedio,  $\bar{d} = 0.55 \pm 0.19$  mm. A partir de ahí se puede obtener el número de colisiones por unidad de tiempo que sufren las esferas dentro de una configuración de IDA. Para ello se ajustó una función gaussiana a las distribuciones de velocidades perpendi-

culares de las esferas dentro del condensado de IDA. La desviación estándar obtenida del ajuste se utilizó para obtener una velocidad cuadrática media,  $\langle v_i^2 \rangle$ . Al dividir por la distancia media entre los dos rodillos se obtuvo la tasa de colisiones, que resultó ser  $68.7 \pm 1.8 \text{ s}^{-1}$ . Por otro lado, la tasa de colisiones promedio entre las esferas que se encuentran fuera de la configuración de IDA se obtuvo utilizando la desviación estándar de la distribución de velocidades perpendiculares correspondiente,  $\langle v_o^2 \rangle$ , y dividiendo entre el camino libre medio,  $l_{\text{MFP}} = 1.8 \text{ mm}$ . Para este caso, la tasa de colisión resulta ser de  $38.3 \pm 1.1 \text{ s}^{-1}$ ; es decir cerca de la mitad (en realidad, 56 %) de la tasa dentro del agregado de IDA.

La potencia transferida a un rodillo por las partículas que chocan contra él dentro o fuera es proporcional a la energía cinética de las partículas multiplicada por el número de ellas que colisionan en una unidad de tiempo. Esta cantidad puede calcularse fácilmente tomando el producto de la densidad superficial de partículas y la velocidad cuadrática media en dirección perpendicular a los rodillos multiplicada por la longitud de éstos. Asimismo, el número de colisiones por unidad de longitud y por unidad de tiempo dentro y fuera de la configuración es la densidad interior o exterior,  $n_i$  o  $n_o$ , multiplicada por la velocidad cuadrática media dentro o fuera; es decir,  $n_i \langle v_i^2 \rangle^{1/2}$  y  $n_o \langle v_o^2 \rangle^{1/2}$ . Por lo tanto, las potencias transferidas a las paredes internas,  $P_i$ , y a las paredes externas,  $P_o$ , están dadas respectivamente por

$$P_i = \frac{1}{2}(1 - \epsilon_{sr})mn_i \langle v_i^2 \rangle^{3/2} \ell; \quad (5.1)$$

$$P_o = \frac{1}{2}(1 - \epsilon_{sr})mn_o \langle v_o^2 \rangle^{3/2} \ell; \quad (5.2)$$

donde  $m = 0.13 \text{ g}$  es la masa de una esfera. Para este caso, el cociente de estas dos cantidades,  $P_o/P_i$  es de 4.9. Esto implica que habrá una atracción neta que crece con la velocidad cuadrática media de las partículas en la fase gaseosa.

La fuerza ejercida sobre el rodillo tanto desde el interior como desde el exterior ( $F_i$  y  $F_o$ , respectivamente) está dada por la potencia transferida,  $P_i$  o  $P_o$ , dividida entre la velocidad  $v_r$  que adquiere el rodillo debido a la colisión con las esferas. Esto es

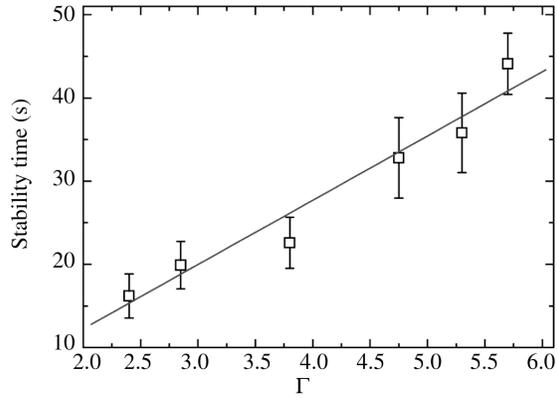
$$F_o - F_i = \frac{P_o - P_i}{v_r}. \quad (5.3)$$

La velocidad  $v_r$  puede medirse a partir del análisis de la dinámica rápida del sistema. Para el caso de una aceleración adimensional,  $\Gamma = 2.4$ , dicha velocidad resulta ser de  $11 \pm 4.5 \text{ mm/s}$ . A partir de la Ec. (5.3) y de los valores medidos de las variables en las Ecs. (5.1) y (5.2), se puede estimar un valor numérico para la fuerza a este valor de  $\Gamma$ . El valor resultante es  $F_o - F_i = 53 \pm 23 \text{ dyn}$ .

A pesar del hecho de que hay un mayor número de colisiones por unidad de tiempo y una mayor densidad superficial de partículas en la región interior —a diferencia de los mecanismos de depleción directa—, las fluctuaciones en el interior son tan fuertemente suprimidas que se forma una presión positiva neta desde el exterior. Esto confirma que la atracción por depleción indirecta está guiada por un mecanismo de *clustering*. En otras palabras, una cadena de esferas atrapada entre dos rodillos efectivamente se condensa y se comporta como un objeto casi rígido.

Como se mencionó anteriormente, para distribuciones de velocidades iguales dentro y fuera del par de rodillos, una densidad de número de partículas atrapadas entre los rodillos mayor induciría una fuerza efectiva repulsiva entre ellos, lo que haría a la configuración de IDA improbable. Además, se esperaría que la estabilidad de dicha configuración decreciera con la intensidad de las fluctuaciones en el gas de esferas que lo rodea, si esta intensidad se incrementa, dado que los rodillos también están sujetos a estas fluctuaciones de velocidades, por lo que tendrían una mayor difusión traslacional y rotacional. Por el contrario, la fuerza entre los rodillos, y por lo tanto, la estabilidad de los agregados de IDA se incrementa conforme la intensidad de las fluctuaciones,  $\Gamma_{\text{fluc}}$ , aumenta (véase la Fig. 5.4).

Figura 5.4: *Tiempo de persistencia de una configuración de IDA aislada como función de la aceleración adimensional  $\Gamma$ .*

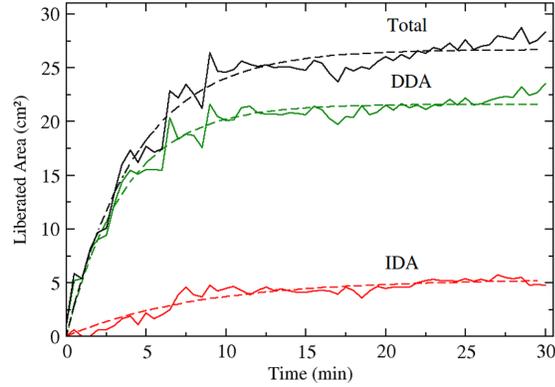


La dependencia de las fuerzas de depleción indirectas con la intensidad de las fluctuaciones se midió indirectamente incrementando la amplitud de oscilación y midiendo la estabilidad (es decir, los tiempos de supervivencia) de una configuración de IDA aislada como condición inicial. Los tiempos de supervivencia resultantes como función de  $\Gamma$  se muestran en la Fig. 5.4. Vale la pena resaltar el hecho de que los dímeros aislados de DDA eran capaces de sobrevivir decenas de minutos o incluso mucho más, lo que da una idea de la gran estabilidad que estos tienen en comparación con los agregados de depleción indirecta.

Con el propósito de tomar en cuenta los efectos de los condensados de IDA en el incremento del área disponible para que las partículas se movieran, se consideró el área sobrepuesta de las esferas atrapadas entre los rodillos de la configuración de IDA como parte del agregado, como si la cadena de esferas se tratara de otro rodillo. En la Fig. 5.5 se muestra una gráfica del área liberada debida a las estructuras de DDA, debida a las estructuras de IDA y a la suma de ambos mecanismos como función del tiempo. En esta figura, las líneas discontinuas representan un ajuste que corresponde a un modelo simple, en el cual el número de agregados de DDA o de IDA formados por unidad de tiempo es proporcional al número de rodillos disponibles y a la intensidad de la interacción. Bajo estas suposiciones, se ajustó a las curvas presentadas la siguiente función del tiempo para el área liberada  $A_L$ :

$$A_L = A_0[1 - \exp(-\kappa t)], \quad (5.4)$$

Figura 5.5: Área liberada como función del tiempo desde el inicio del experimento para rodillos formando dímeros de DDA (línea verde sólida), configuraciones de IDA (línea roja sólida) y ambos mecanismos (línea negra sólida). Las líneas discontinuas representan una función de ajuste como se describe en la Eq. (5.4).



donde  $A_0$  es un área liberada asintótica y  $\kappa$  es el recíproco de un tiempo característico, en el cual el fenómeno de agregación se lleva a cabo; ambas variables se dejaron como parámetros de ajuste.

Los tiempos característicos ( $\kappa^{-1}$ ) que determinan la cinética de agregación deberían ser proporcionales a la intensidad de la interacción, dando lugar a una cinética de agregación más rápida conforme se incrementa la intensidad de la oscilación. En nuestro caso, el cociente de estos parámetros para la interacción de depleción directa y para la de depleción indirecta,  $\kappa_{DDA}/\kappa_{IDA}$ , da un valor de 3.0. Por otra parte, el cociente de la presión externa a la presión interna ( $P_o/P_i = 4.9$ ), aunque tiene un valor similar al de 3.0, dado que representa una medida de cuán intensa es la fuerza de DDA, comparada con la de IDA, no da exactamente igual. La diferencia entre estos dos valores se puede explicar por el hecho de que la cinética de agregación está determinada para un conjunto de muchos rodillos, mientras que el cociente de presiones fue obtenido para una configuración de IDA aislada. En el caso de las constantes cinéticas de agregación — $\kappa_{DDA(IDA)}$ —, dada la gran cantidad de rodillos, las configuraciones de IDA aún puede proveer rodillos para formar pares de depleción directa y, por tanto, las cinéticas de agregación están acopladas. Los tiempos de supervivencia pueden entenderse como una medida del tiempo de disociación para los agregados de IDA, el cual debería crecer linealmente al incrementarse la intensidad de la interacción de IDA. Esto, a su vez, incrementaría la cinética de agregación que forma pares de IDA, como se revela en los experimentos.

Las condiciones de frontera alrededor de la superficie de los intrusos o de las paredes del sistema son de gran importancia para entender la formación de agregados de IDA. En los experimentos se observa un incremento en la densidad local alrededor de un rodillo o cerca de las paredes, similar al efecto de mojado o formación de capas que ocurre en sistemas coloidales [34]. El mojado que aparece en nuestros experimentos también ha sido observado en simulaciones [36] como un incremento en la densidad en regiones cercanas a intrusos (o a las paredes) o como una capa de partículas adsorbidas que se mantienen en contacto con las paredes por fuerzas de depleción un suspensiones de esferas duras coloidales activas. En la Fig. 5.6 se muestran veinte imágenes superpuestas tomadas a intervalos de 20 ms que muestran este «mojado granular» y que

aparece únicamente cuando la pared que confina al sistema y el plato son suaves; esta formación de capas no aparece cuando se incrustan esferas en el plato. La Fig. 5.6a muestra un par típico de IDA localizado en el centro del plato. En esta imagen, la supresión del movimiento perpendicular a los rodillos de las partículas atrapadas puede verse claramente, así como un gradiente de movilidad desde la superficie externa del rodillo hacia el bulto de la fase gaseosa. Este efecto ocurre como consecuencia de la naturaleza inelástica de las colisiones entre esferas y entre esferas y rodillos, lo cual da lugar a un efecto de *clustering*. En la Fig. 5.6b las imágenes sobrepuestas fueron tomadas cerca del borde del plato cuando la base y la pared lateral son suaves. Se puede observar que aparece una formación de capas y una movilidad creciente de partículas hacia el centro del plato.

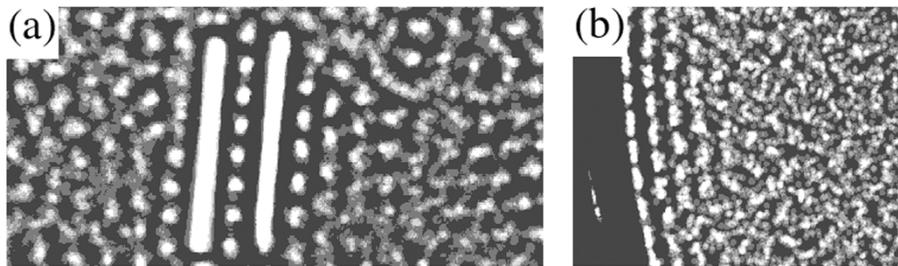


Figura 5.6: (a) Imágenes sobrepuestas de las esferas en la región interior de una configuración de IDA y en su vecindad. (b) Imágenes sobrepuestas de las esferas en la región cercana al borde del plato cuando las paredes y el suelo son suaves (sin esferas incrustadas en el último).

La densidad de esferas se incrementa cerca de una pared o de un intruso formando una capa de partículas de baja movilidad atrapadas entre la fase gaseosa y la superficie. En sistemas coloidales se han calculado similares perfiles de densidad [5, 37]; dichos perfiles representan la semilla de un mojado que posteriormente se convierte en un verdadero mojado o capa adsorbida si existe una interacción atractiva entre la pared y las partículas. En este sistema esto es lo que ocurre, puesto que la naturaleza inelástica de las colisiones entre esferas y entre esferas y rodillos actúa como un potencial efectivo atractivo, que ya ha sido reportado anteriormente en sistemas con esferas solamente [33]. De manera similar, podría considerarse que una partícula suave tiene un potencial atractivo diferente y podría presentar el mismo fenómeno a un radio efectivo diferente.

El incremento en la densidad de esferas cerca de la superficie de un intruso debido a las interacciones de depleción genera el comienzo de una condensación alrededor de un rodillo. El *clustering* provoca una disminución de la distancia entre partículas, por lo que el número de colisiones por unidad de tiempo y la tasa de disipación se incrementa. Por otro lado, dado que las partículas se encuentran atrapadas entre dos rodillos masivos, éstas son guiadas por los rodillos siguiendo el movimiento vertical transferido por el sistema oscilante. Estos dos fenómenos refuerzan la fase más densa observada entre dos intrusos paralelos.

Debe resaltarse que el sistema aquí presentado está lejos del equilibrio; por esta razón, el principio de maximización de la entropía no puede invocarse directamente como el responsable de la formación de estructuras de IDA. En vez de ello, se propone el principio de minimización de la producción de entropía de Prigogine [38] como el mecanismo de autoorganización responsable de la formación de condensados de IDA. Un ejemplo de ellos se da en el crecimiento epitaxial de cristales granulares. Ahí, las partículas se establecen en posiciones que se mueven sincronamente o en fase con sus vecinos cercanos y la posición de establecimiento corresponde al lugar donde el número de coordinación es máximo [39]. Esto permite que el momento horizontal sea disipado a la misma tasa a la que es adquirido, lo que minimiza la tasa de producción de entropía. De manera similar, el proceso de formación de estructuras de IDA minimiza la producción de entropía, puesto que las partículas atrapadas entre dos rodillos sincronizan su movimiento con el movimiento vertical de los rodillos.

### 5.2. Medición experimental del potencial efectivo

Como se mencionó en la Sec. 2.5, se obtuvo una lista de posiciones cada 5 s y dicha lista se convirtió en un histograma para obtener una función de distribución  $g(x)$ , donde  $x$  es la distancia medida desde la varilla fija al centro del rodillo móvil. Esta función de distribución puede observarse en la Fig. 5.7. Conviene señalar que la obtención de datos experimentales es una tarea bastante complicada, lo que dificulta la obtención de una estadística significativa. Por tal motivo, el histograma obtenido se realizó aumentando el tamaño de *bin* conforme la distancia y aumentaba, dado que a esta distancia se tienen menos datos estadísticos. De esta manera se reduce el ruido estadístico en las partes más alejadas de la distribución. Los valores de cada bin se ponderaron dividiendo entre el número de datos por unidad de longitud, de manera que todos tuvieran el mismo peso estadístico.

En la figura anterior puede verse claramente que, para posiciones cercanas al rodillo fijo al suelo, el rodillo móvil tiende a preferir posiciones que son aproximadamente múltiplos de  $\sigma$ . Esto se debe a que el material granular, como se explicó en la sección anterior, tiende a crear capas sobre la superficie de la varilla fija. Los picos observados en la función  $g(x)$  corresponden pues a las posiciones donde el rodillo queda detenido por estas capas de «mojado». La posición de los picos no cae exactamente en múltiplos de  $\sigma$ , sino que se va recorriendo paulatinamente. Esto se debe a que, aunque hay efecto de *clustering*, las esferas no pierden de forma absoluta su movilidad y tienen un poco de movimiento que hace un poco más anchas las capas de mojado.

De la función  $g(x)$  obtenida experimentalmente es posible extraer un potencial efectivo. Dado que se trata de únicamente dos partículas, la función de distribución cumple con la relación (véase la Ec. (4.1) y la explicación en la Sec. 4.1):

$$g(x) = \exp\left[-\frac{U(x)}{kT}\right],$$

donde, en sistemas conservativos,  $k$  representa la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. Aquí se puede definir un potencial adimensional, para evitar complicaciones con

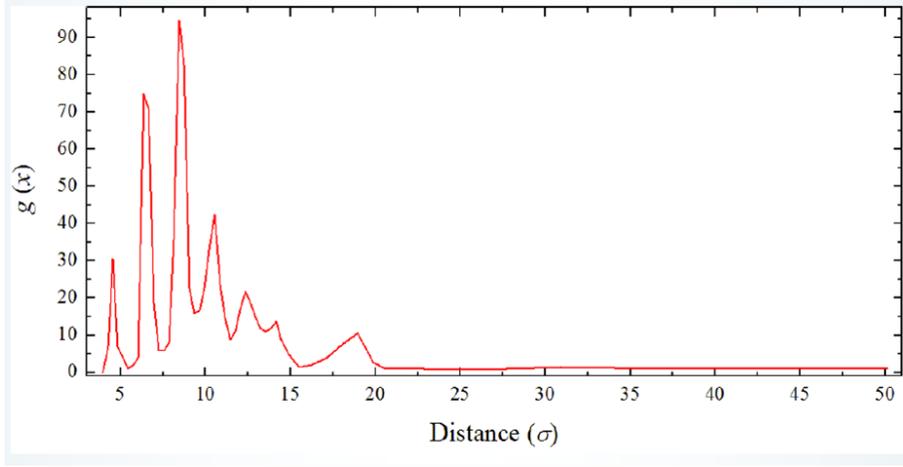


Figura 5.7: Función de distribución de posiciones,  $g(x)$ , del rodillo móvil, con  $x$  la distancia medida desde la varilla fija al suelo.

la definición de temperatura en medios granulares. De la ecuación anterior se obtiene

$$\frac{U(r)}{kT} = -\ln[g(x)]. \quad (5.5)$$

El histograma de la Fig. 5.7, convertido a potencial con la ecuación anterior, se muestra en la Fig. 5.8.

Se puede notar que el potencial es atractivo en buena parte del espacio, hasta una distancia de unos  $10\sigma$ . Es decir, el efecto de mojado que se forma en la superficie crea, en efecto una atracción entre los dos rodillos que puede llegar a largas distancias.

### 5.3. Simulaciones

Al igual que en la sección anterior, se obtuvo una lista de posiciones del esferocilindro, y de ahí se hizo un histograma, del cual se obtuvo la función de distribución de posiciones  $g(x)$ . Para este caso se extrajeron los datos cada  $1/60$  s, lo que permitió tener una mayor cantidad de información estadística. Por esta razón, es posible obtener funciones de distribución variando diferentes parámetros. Los parámetros modificados fueron  $\mu_{sr}$ ,  $\epsilon_{sr}$  y  $\phi$ . En la Fig. 5.9 se muestra el comportamiento de la  $g(x)$  como función de la fracción de llenado  $\phi$ , para una aceleración adimensional  $\Gamma = 1.5$ . Asimismo, en la Fig. 5.10 se muestra el comportamiento de la  $g(x)$  variando el coeficiente de restitución esfera-rodillo y en la Fig. 5.11 el comportamiento variando el coeficiente de fricción esfera-rodillo, en ambos casos para diferentes aceleraciones adimensionales  $\Gamma = 1.5$ ,  $\Gamma = 2.0$ ,  $\Gamma = 2.5$  y  $\Gamma = 3.0$ .

De la misma manera que como se hizo con los resultados experimentales, se obtuvo un potencial efectivo a través de la Ec. (5.5) para cada una de las funciones de distribución. La forma del potencial efectivo se muestra para diferentes  $\phi$  y  $\Gamma = 1.5$  en la

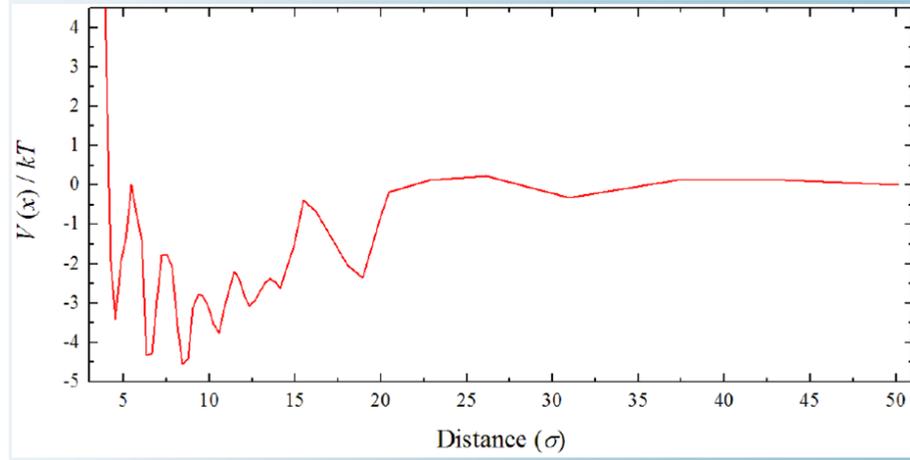


Figura 5.8: Potencial  $U(x)/kT$  obtenido de la inversión del histograma de la Fig. 5.7, usando la Ec. (5.5).

Fig. 5.12; para diferentes  $\epsilon_{sr}$  y  $\Gamma = 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$ , en la Fig. 5.13, y para diferentes  $\mu_{sr}$  y los mismos valores de  $\Gamma$ , en la Fig 5.14.

Puede verse que, en el caso simulacional, aunque se preserva la estructura de picos —y por lo tanto, la presencia de capas de mojado sobre la superficie de la pared—, hay diferencias evidentes en la forma global de la función de distribución y del potencial. La principal diferencia se ve en los mínimos entre picos de la  $g(x)$  (o los máximos o zonas divergentes en el potencial). En el caso experimental los mínimos nunca llegan a cero sino que tienen un valor finito, mientras que, en el caso simulacional, los primeros mínimos están muy cercanos a cero o son efectivamente cero. Esto puede deberse a la restricción impuesta sobre el esferocilindro para adquirir orientaciones alejadas del paralelismo con la pared. En los experimentos, aunque el rodillo era obligado a regresar a su orientación original, esto solamente se hacía si persistía un tiempo en orientaciones más allá de los  $10^\circ$ . En cambio, si rotaba más allá de este ángulo, pero en poco tiempo regresaba a la orientación original, se continuaba el experimento. Esto le permitía al rodillo pasar de una capa de hidratación a otra sin tener que vencer la repulsión impuesta por las esferas que puede observarse en los potenciales simulacionales.

Independientemente de las diferencias entre los casos experimental y simulacionales, se demuestra que existe un potencial efectivo de largo alcance que tiene influencia más allá del potencial clásico de depleción. Es decir, *existe una fuerza neta entre dos intrusos inmersos en un sistema de esferas granulares que actúa a distancias mayores que las zonas donde los volúmenes excluidos se traslapan.*

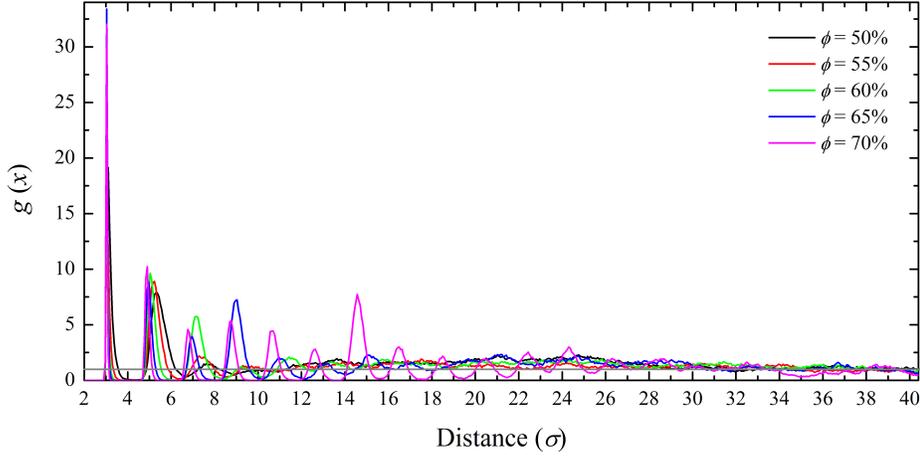


Figura 5.9: Comportamiento de las funciones de distribución de posiciones del esfero-cilindro variando la fracción de empaquetamiento  $\phi$  para una aceleración adimensional de  $\Gamma = 1.5$ .

#### 5.4. Cálculo teórico del potencial de interacción

El modelo teórico desarrollado en la Sec. 4.2 fue probado utilizando una de las funciones de distribución obtenidas simulacionalmente. En este caso se utilizó una simulación hecha con los siguientes parámetros:  $\Gamma = 2.5$ ,  $\epsilon_{sr} = 0.5$ ,  $\mu_{sr} = 0.4$  y  $\phi = 60\%$ . Se tomó el primer pico de la distribución y se ajustó la función dada en la Ec. (4.6) dejando como parámetros de ajuste la función  $W(\epsilon, kT)$  y la constante  $F_0$ .

En la Fig. 5.15 se muestran los datos obtenidos a partir de la simulación (cuadros rojos) y el ajuste teórico (línea punteada en azul). La función teórica ajusta bastante bien para el lado derecho de la curva numérica, pero falla en el lado izquierdo. La razón de que el ajuste no sea bueno en la parte izquierda se debe a que el análisis teórico no toma en cuenta que el sistema no es completamente bidimensional. De hecho, cuando una hilera de esferas queda atrapada entre la pared y el rodillo, este último tiene la posibilidad de subir ligeramente sobre la cadena de esferas por lo que hay una cierta posibilidad diferente de cero de encontrar el centro del rodillo a una distancia menor a 3 radios de partícula (que es, precisamente, el valor que puede observarse a una distancia justo antes de  $3.0\sigma/2$ ).

Los demás picos observados en las funciones de distribución, como ya mencionamos, se deben a la formación de «capas de hidratación» sobre la frontera del sistema. La primera capa tiene una movilidad reducida, debido al fenómeno de *clustering*, por lo que puede actuar como una nueva frontera e interactuar con la segunda capa. La interacción con la segunda capa debe estar mediada de una forma similar a la interacción entre la primera capa y el rodillo (o la frontera). La diferencia en este caso es que ahora el coeficiente de restitución esfera-esfera juega un papel en conjunto con el coeficiente de restitución esfera-rodillo. Siendo este el caso, el único cambio que debe hacerse es

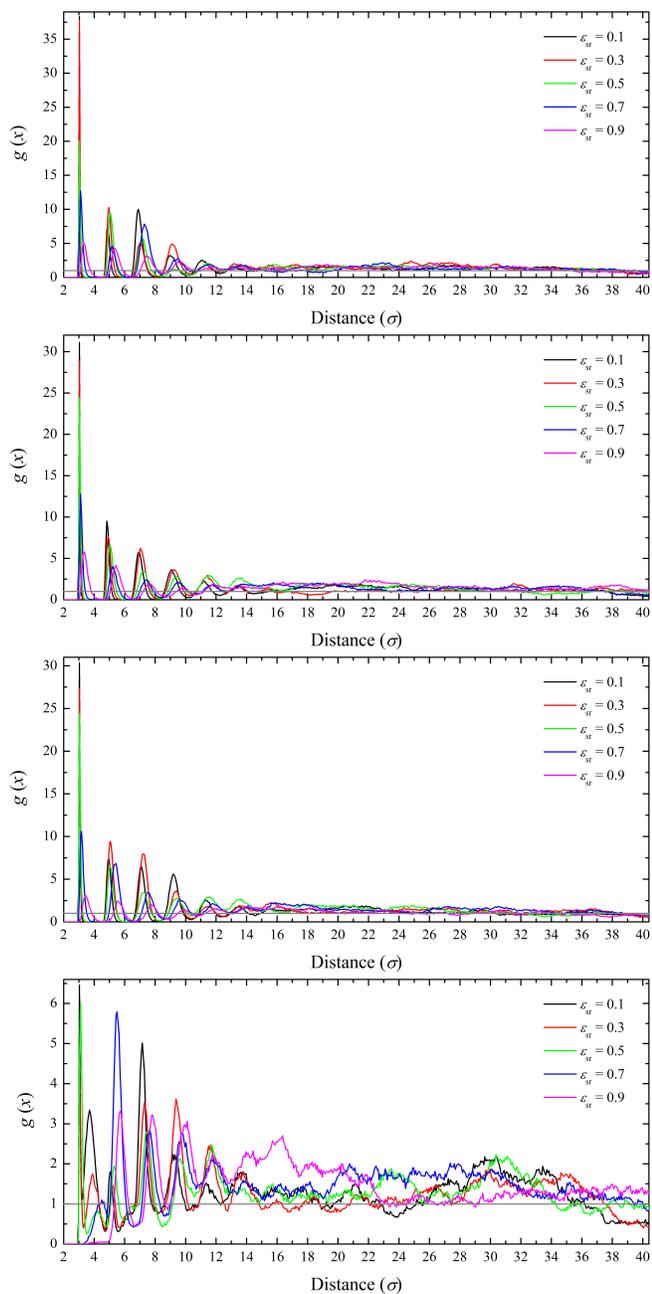


Figura 5.10: Comportamiento de las funciones de distribución de posiciones del esferocilindro variando el coeficiente de restitución esfera-cilindro para diferentes aceleraciones adimensionales; de arriba a abajo:  $\Gamma = 1.5$ ,  $\Gamma = 2.0$ ,  $\Gamma = 2.5$  y  $\Gamma = 3.0$ .

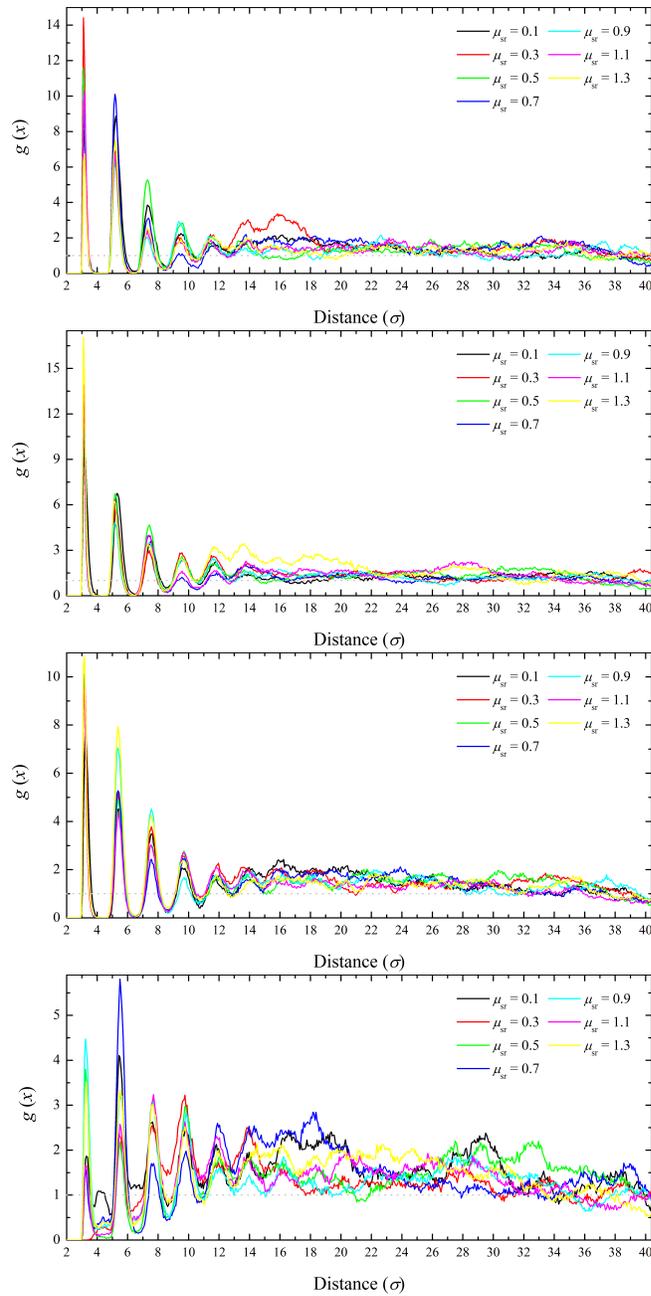


Figura 5.11: Comportamiento de las funciones de distribución de posiciones del esferocilindro variando el coeficiente de fricción esfera-cilindro para diferentes aceleraciones adimensionales; de arriba a abajo:  $\Gamma = 1.5$ ,  $\Gamma = 2.0$ ,  $\Gamma = 2.5$  y  $\Gamma = 3.0$ .

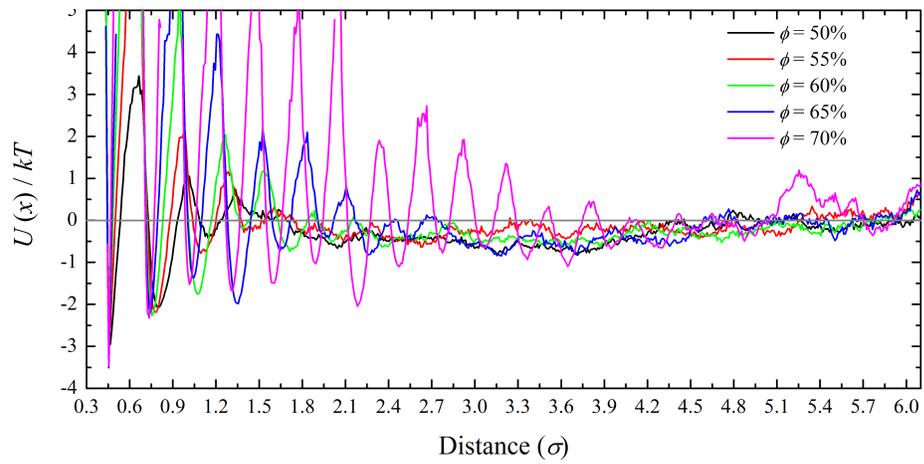


Figura 5.12: Potenciales efectivos entre la pared y el esferocilindro variando la fracción de empaquetamiento  $\phi$  para una aceleración adimensional de  $\Gamma = 1.5$ .

cambiar la función  $W(\epsilon, kT)$ , por una función  $W(\epsilon_{sr}, \epsilon_{ss}, kT)$  en la Ec. (4.6). Se hizo esto, dejando como parámetro de ajuste esta nueva función, para el segundo pico de la distribución mencionada anteriormente. El resultado se muestra en la Fig. 5.16. En este caso la función ajusta excelentemente, sin prácticamente ninguna desviación de los datos numéricos.

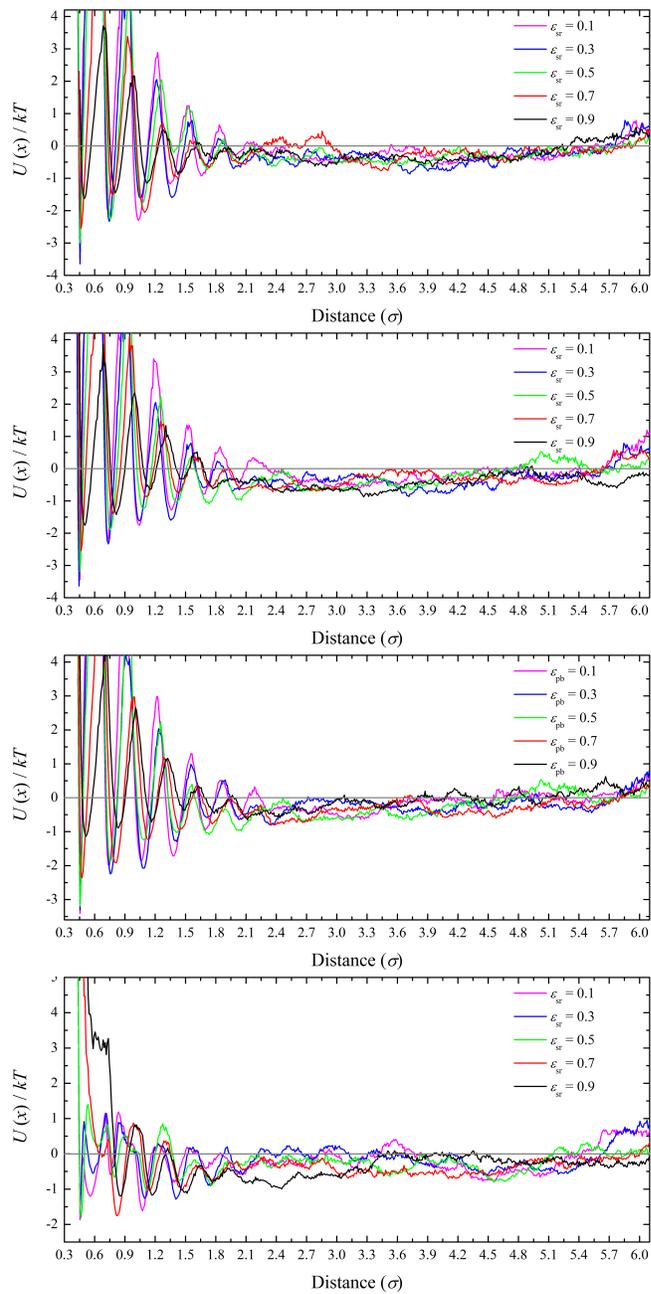


Figura 5.13: Potenciales efectivos entre la pared y el esferocilindro variando el coeficiente de restitución esfera-cilindro para diferentes aceleraciones adimensionales; de arriba a abajo:  $\Gamma = 1.5$ ,  $\Gamma = 2.0$ ,  $\Gamma = 2.5$  y  $\Gamma = 3.0$ .

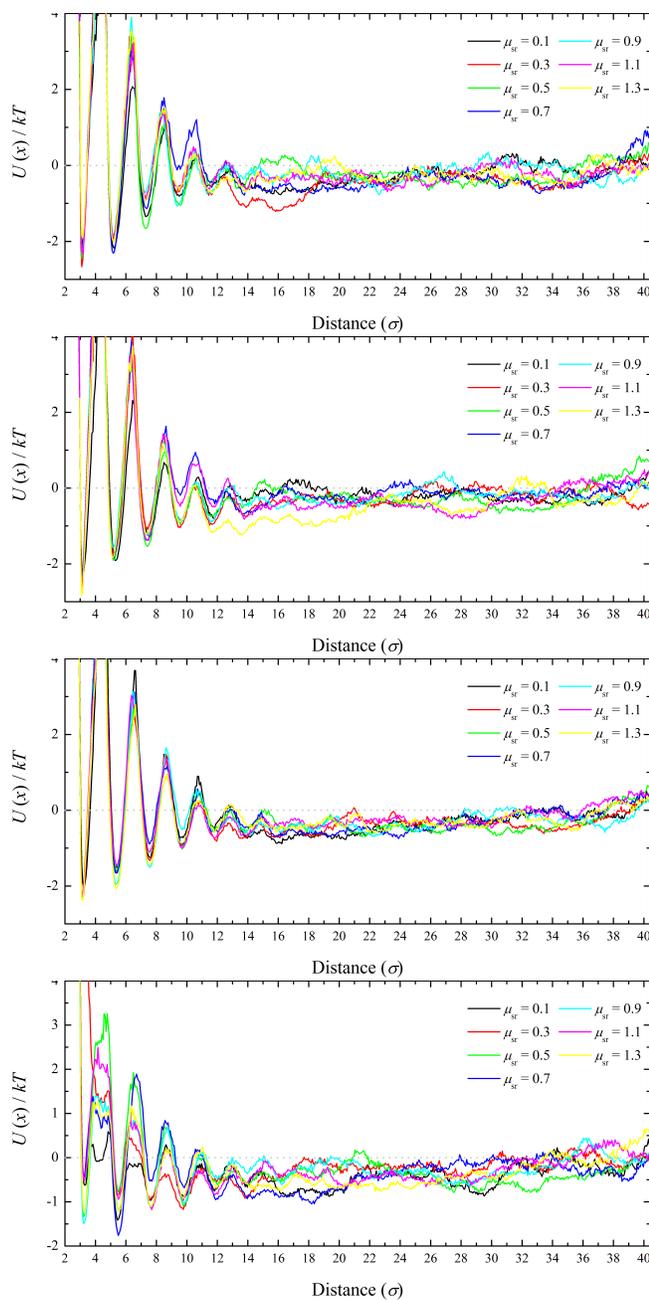


Figura 5.14: Potenciales efectivos entre la pared y el esferocilindro variando el coeficiente de fricción esfera-cilindro para diferentes aceleraciones adimensionales; de arriba a abajo:  $\Gamma = 1.5$ ,  $\Gamma = 2.0$ ,  $\Gamma = 2.5$  y  $\Gamma = 3.0$ .

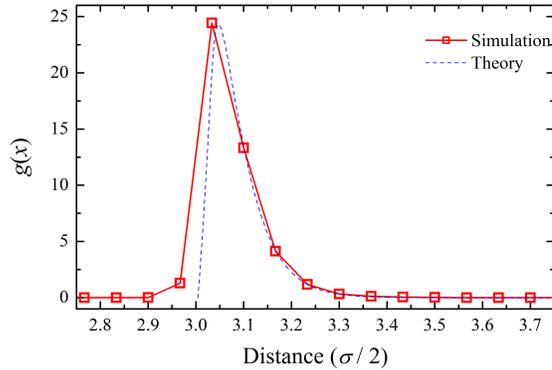


Figura 5.15: Los cuadros rojos muestran los datos para el primer pico de la función de distribución de posiciones de una simulación realizada a  $\Gamma = 2.5$ ,  $\epsilon_{sr} = 0.5$ ,  $\mu_{sr} = 0.4$  y  $\phi = 60\%$ . La línea punteada en azul representa un ajuste teórico usando la función descrita por la Ec. (4.6).

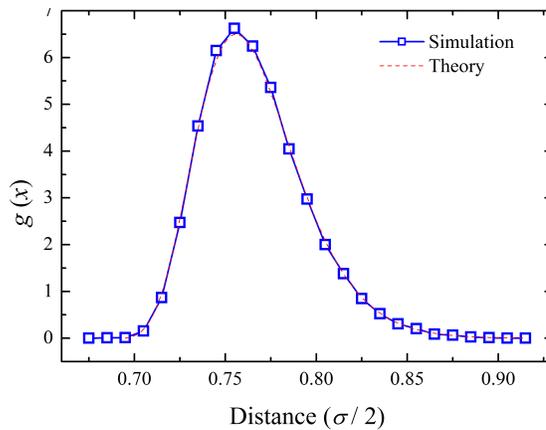


Figura 5.16: Segundo pico de la distribución de posiciones de la simulación descrita en la Fig. 5.15. Los cuadros azules muestran los datos numéricos, mientras que la línea punteada en rojo corresponde al ajuste teórico.



## Capítulo 6

### Conclusiones

- Se ha investigado un gas granular bidimensional compuesto de una mezcla de rodillos granulares y esferas, en el cual ocurre una segregación de los rodillos al incrementarse la entropía por la reducción del área excluida y por la disipación de la energía que da lugar a una inestabilidad de *clustering*. El área disponible a las esferas es liberada cuando dos o más rodillos se tocan lado a lado o cuando se crean agregados de depleción indirecta. Además, estas estructuras suprimen la capacidad de las esferas atrapadas entre rodillos de adquirir momento lineal en la dirección perpendicular a los rodillos. Esto provoca un desequilibrio de presiones entre el interior y el exterior de la configuración, lo que da lugar a una atracción neta efectiva entre los rodillos. Lo anterior se demuestra a través de distribuciones de velocidades en las direcciones paralela y perpendicular a los rodillos para esferas en el interior y el exterior de configuraciones de depleción indirecta. Se muestra que los tiempos de supervivencia de configuraciones de depleción indirecta crecen linealmente con la amplitud de oscilación del sistema, lo que refuerza la hipótesis de que estas estructuras son causadas por una estabilidad de *clustering*.
- Se realizaron experimentos y simulaciones para medir la forma del potencial de interacción entre dos rodillos. Los resultados muestran un comportamiento con picos que aparecen en posiciones que son casi múltiplos de los diámetros de esferas. Esos picos se deben a la formación de capas sobre la superficie de los objetos intrusos. Asimismo se demuestra que existe un potencial efectivo de largo alcance, que actúa a distancias mayores que la región de acción del potencial clásico de depleción. Por medio de simulaciones, se halla la forma en que varía el potencial al cambiar diferentes parámetros físicos del sistema: el coeficiente de restitución esfera-rodillo, el coeficiente de fricción esfera-rodillo, la fracción de empaquetamiento y la aceleración adimensional.
- Se elaboró un modelo teórico para obtener el potencial de interacción entre dos rodillos debido a la pérdida de energía por colisiones de partículas atrapadas entre ellos. Se obtuvo una función que depende del coeficiente de restitución, la cual, al dejarse como parámetro libre, permite realizar un ajuste bastante bueno a los datos obtenidos en las simulaciones para el primero y el segundo de la distribución de posiciones.



## Bibliografía

- [1] WAIGH TA (2014). *The Physics of Living Processes: A Mesoscopic Approach*, p. 62. Ed. John Wiley & Sons. ISBN 1118449940.
- [2] LIFSHITZ EM (1956). «The Theory of Molecular Attractive Forces Between Solids». *Soviet Physics*, **2**, 73.
- [3] OOSAWA F, ASAKURA S (1954). «Surface Tension of High-Polymer Solutions». *Journal of Chemical Physics*, **22**, 1255.
- [4] HOOVER WG, REE FH (1968). «Melting Transition and Communal Entropy for Hard Spheres». *Journal of Chemical Physics*, **49**, 3609–3617.
- [5] LEKKERKERKER HNW, TUINIER R (2011). «Colloids and the Depletion Interaction». *Lecture Notes in Physics*, **833**, Ed. Springer Verlag.
- [6] ADAMS M, DOGIC Z, KELLER SL, FRADEN S (1998). «Entropically driven microphase transitions in mixtures of colloidal rods and spheres». *Nature*, **393**, 349–352.
- [7] BOSE M, KUMAR UU, NOTT PR, KUMARAN V (2005). «Brazil nut effect and excluded volume attraction in vibrofluidized granular mixtures». *Physical Review E*, **72**(2), 021305.
- [8] MELBY P, PREVOST A, EGOLF DA, URBACH JS (2007). «Depletion force in a bidisperse granular layer». *Physical Review E*, **76**(5), 051307.
- [9] SANDERS DA, SWIFT MR, BOWLEY RM, KING PJ (2004). «Are Brazil Nuts Attractive?» *Physical Review Letters*, **93**(20), 208002.
- [10] DURAN J, JULLIEN R (1998). «Attractive Forces in a Granular Cocktail». *Physical Review Letters*, **80**, 3547–3550.
- [11] GALANIS J, NOSSAL R, HARRIES D (2010). «Depletion forces drive polymer-like self-assembly in vibrofluidized granular materials». *Soft Matter*, **6**, 1026.
- [12] AJDARI A, PELITI L, PROST J (1991). «Fluctuation-Induced Long-Range Forces in Liquid Crystals». *Physical Review Letters*, **66**, 1481.
- [13] KEESOM WH (1914). «The second virial coefficient for rigid spherical molecules, whose mutual attraction is equivalent to that of a quadruplet placed at their centre». *Proceedings of the Royal Academy of Sciences*, **18**, 636.
- [14] ROBERTS JK, ORR WJC (1938). «Induced dipoles and the heat of adsorption of argon on ionic crystals». *Transactions of the Faraday Society*, **34**, 1346.

- [15] LONDON F (1930). «Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte». *Zeitschrift für Physik*, **63**, 245.
- [16] CASIMIR HBG (1948). «On the attraction between two perfectly conducting plates». *Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*, **B51**, 793–795.
- [17] DZIALOSHINSKII IE, LIFSHITZ EM, PITAEVSKII LP (1961). «The general theory of van der Waals forces». *Advances in Physics*, **10**, 165.
- [18] FISHER ME, DE GENNES PG (1978). «Phénomènes aux parois dans un mélange binaire critique» *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris B*, **287**, 207.
- [19] HERTLEIN C, HELDEN L, GAMBASSI A, DIETRICH S, BECHINGER C (2008). «Direct measurement of critical Casimir forces». *Nature*, **451**, 172–175.
- [20] WU X, MÅLØY KJ, HANSEN A, AMMI M, BIDEAU D (1993). «Why hour glasses tick». *Physical Review Letters*, **71**, 1363–1366.
- [21] CATTUTO C, BRITO R, MARCONI UMB, NORI F, SOTO R (2006). «Fluctuation-induced casimir forces in granular fluids». *Physical Review Letters*, **96**(17), 178001.
- [22] BRITO R, MARCONI UMB, SOTO R (2007). «Generalized Casimir forces in nonequilibrium systems». *Physical Review E*, **76**, 011113.
- [23] BRITO R, SOTO R, MARCONI UMB (2007). «Casimir forces in granular and other non equilibrium systems». *Granular Matter* **10**, 29–36.
- [24] SPAHN F, PETZSCHMANN O, THIESSENHUSEN KU, SCHMIDT J (1998) “Inelastic Collisions in Planetary Rings: Thickness and Satellite-Induced Structures”. En: Herrmann HJ, Hovi JP, Luding S, editores. «Physics of Dry Granular Media». *NATO ASI Series*, **350**, 401–406. Ed. Springer Netherlands.
- [25] FUJIWARA A, KAWAGUCHI J, YEOMANS DK, ABE M, MUKAI T, OKADA T, *et al.* (2006). «The Rubble-Pile Asteroid Itokawa as Observed by Hayabusa.» *Science*, **312**(5778), 1330–1334.
- [26] JAEGER HM, NAGEL SR, BEHRINGER RP (1996). «Granular solids, liquids, and gases». *Reviews of Modern Physics*, **68**, 1259–1273.
- [27] VAN DER MEER D (2004). «Compartmentalized granular gases: clustering and directed transport». Tesis doctoral, Universidad de Twente, Países Bajos.
- [28] ROSATO A, STRANDBURG KJ, PRINZ F, SWENDSEN RH (1987). «Why the Brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking». *Physical Review Letters*, **58**, 1038.

- [29] ZURIGUEL I, BOUDET JF, AMAROUCHENE Y, KELLAY H (2005). «Role of Fluctuation-Induced Interactions in the Axial Segregation of Granular Materials». *Physical Review Letters*, **95**, 258002.
- [30] GOLDBIRSCH I, ZANETTI G (1993). «Clustering instability in dissipative gases». *Physical Review Letters*, **70**, 1619–1622.
- [31] DURAN J (2000). *Sands, Powders and Grains; An Introduction to the Physics of Granular Materials*, pp. 3–4. Ed. Springer-Verlag ISBN 0387986561
- [32] OLAFSEN JS, URBACH JS (1998). «Clustering, Order, and Collapse in a Driven Granular Monolayer». *Physical Review Letters*, **81**, 4369–4372.
- [33] BORDALLO-FAVELA RA, RAMÍREZ-SAÍTO A, PACHECO-MOLINA CA, PERERA-BURGOS JA, NAHMAD-MOLINARI Y, PÉREZ G (2009). «Effective potentials of dissipative hard spheres in granular matter». *European Physics Journal E*, **28**, 395.
- [34] ISRAELACHVILI JN, PASHLEY RM (1983). «Molecular layering of water at surfaces and origin of repulsive hydration forces». *Nature*, **306**, 249–250.
- [35] SHIDA K, KAWAI T (1989). «Cluster formation by inelastically colliding particles in one-dimensional space». *Physica A*, **162**, 145–160.
- [36] NI R, COHEN STUART MA, BOLHUIS PG (2015). «Tunable Long Range Forces Mediated by Self-Propelled Colloidal Hard Spheres». *Physical Review Letters*, **114**(1), 018302.
- [37] FISHER IZ (1964). «Statistical theory of liquids». En: *International monographs on advanced mathematics and physics*, Ed. University of Chicago Press.
- [38] PRIGOGINE I (1947). *Étude thermodynamique des phénomènes irréversibles:(... paru dans la collection des thèses d'agrégation de l'enseignement supérieur de l'Université libre de Bruxelles)*. Dunod.
- [39] NAHMAD-MOLINARI Y, RUIZ-SUÁREZ JC (2002). «Epitaxial Growth of Granular Single Crystals». *Physical Review Letters*, **89**(26), 264302.
- [40] KUWABARA G, KONO K (1987). «Restitution Coefficient in a Collision between Two Spheres». *Japanese Journal of Applied Physics*, **26**(8), 1230.
- [41] PUGLISI A, MARINI BETTOLO MARCONI U, PETRI A, VULPIANI A (1998). «Clustering and Non-Gaussian Behavior in Granular Matter». *Physical Review Letters*, **81**, 3848.
- [42] DU Y, LI H, KADANOFF LP (1995). «Breakdown of Hydrodynamics in a One-Dimensional System of Inelastic Particles». *Physical Review Letters*, **74**, 1268.
- [43] PÉREZ G (2008). «Numerical simulations in granular matter: The discharge of 2D silo». *Pramana Journal of Physics*, **70**, 989.

- [44] SCHÄFER J, DIPPEL S, WOLF DE (1996). «Force Schemes in Simulations of Granular Materials» *Journal de Physique I*, **6**(1), 5.
- [45] CUNDALL PA, STRACK ODL (1979). «A discrete numerical method for granular assemblies». *Géotechnique* **29**(1), 47.
- [46] PERERA-BURGOS JA, PÉREZ-ÁNGEL G, NAHMAD-MOLINARI Y (2010). «Diffusivity and weak clustering in a quasi-two-dimensional granular gas» *Physical Review E* **82**, 051305.
- [47] CHANDLER D (1987) *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, pp 198–206. Ed. Oxford University Press. ISBN 0195042778
- [48] RODRÍGUEZ-LIÑÁN GM, NAHMAD-MOLINARI Y, PÉREZ-ÁNGEL G (2016). «Clustering-Induced Attraction in Granular Mixtures of Rods and Spheres». *PLOS ONE*, **11**(5), e0156153.