

# ESTUDIO COMPUTACIONAL DE UN MEDIO GRANULAR HÚMEDO FORZADO

Silvio René Morales Suárez

Tutor: Dr. Ignacio Pagonabarraga Mora

*Departamento de Física Fundamental, Universidad de Barcelona*

## Resumen

En este trabajo se añade una extensión a *Ludwig*<sup>(3)</sup> para simular medios granulares húmedos. Se utiliza el método *Lattice-Boltzmann* para simular un fluido en el que se introducen esferas duras que colisionan inelásticamente. El medio se fuerza agitando aleatoriamente todos los granos o aplicando una fuerza constante sobre uno de ellos, lo que permite medir las propiedades globales y locales del sistema.

**Palabras clave:** lattice-boltzmann, grano, fluidos, microreología

## 1. Introducción

Un *medio granular* se compone de partículas macroscópicas, *granos*, que pueden encontrarse en el vacío o inmersas en un fluido. Entre estas no actúan fuerzas atractivas, solo fuerzas disipativas de repulsión, lo que lleva a que las colisiones sean inelásticas y no se conserve la energía mecánica del sistema. El carácter disipativo de estas colisiones es el responsable de que los medios granulares, en dependencia de las condiciones en que se encuentren, se comporten como un sólido, líquido o gas.

El comportamiento peculiar, y la importancia que tienen para la industria materiales con estas características, ha hecho que en los últimos años el estudio científico de medios granulares haya experimentado un desarrollo considerable.

La mayor parte de los estudios que se han realizado sobre este tipo de material se centran en medios granulares secos en los que sólo se tiene en cuenta la interacción entre las partículas.

En muchas situaciones se puede despreciar el efecto que ejerce el fluido donde se encuentran los granos y tratar el sistema como un medio granular seco, pero en otras<sup>(7)</sup> hay que tener en cuenta además la relación fluido-grano, llevándonos a modelos más complejos.

En este trabajo nos enfocamos en sistemas como estos últimos, creando una aplicación computacional que permita estudiar la respuesta de *medios granulares húmedos* y ayude a comprender el comportamiento de este tipo de material, sobre todo en estados estacionarios fuera del equilibrio.

Al estar los granos en contacto con un fluido pierden energía y después de un tiempo llegan a estar en reposo, por lo tanto es necesario aplicarles un esfuerzo externo con el objetivo de alcanzar un estado estacionario en el cual se puedan medir cantidades estadísticas

significativas. Con este fin vamos a realizar dos tipos de simulaciones.

En una agitaremos todo el sistema, para tener resultados de la respuesta global, aplicando una fuerza aleatoria sobre cada una de las partículas. Aunque esto es un modelo idealizado, permite obtener un estado homogéneo más fácil de estudiar.

En otro tipo de simulaciones aplicaremos una fuerza constante a una partícula seleccionada para medir propiedades microscópicas, que podremos comparar con resultados experimentales<sup>(6)</sup> obtenidos utilizando pinzas ópticas para arrastrar a velocidad constante una partícula aislada del resto.

## 2. *Ludwig*: Lattice-Boltzmann

Para simular un medio granular húmedo se utilizó *Ludwig*<sup>(3)</sup>, añadiéndole una extensión para el tratamiento inelástico de las colisiones entre partículas.

*Ludwig* es un software escrito en C para simular modelos de *Lattice-Boltzmann*(LB) en 3D sobre láti- ces cúbicas. Permite incluir objetos sólidos, paredes estáticas o en movimiento y coloides en suspensión, en contacto con el fluido.

A pesar de estar escrito en el lenguaje de programación C por cuestiones de eficiencia y portabilidad, *Ludwig* fue desarrollado siguiendo una estructura modular y jerárquica que facilitó extenderlo para tener en cuenta los cambios necesarios en nuestro trabajo. Minimizando así la necesidad de cambios en el código existente, que permitió una mayor concentración de esfuerzo en la puesta a punto del nuevo código y el uso de MPI para el cálculo en paralelo.

LB es una aproximación mesoscópica del movimiento de un fluido que se basa en la ecuación de Bol-

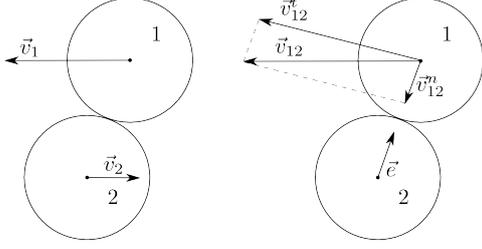


Figura 1: Colisión entre partículas

tzmann discretizada en el espacio de velocidades.

$$f_i(x + \vec{c}_i, t + 1) = f_i(x, t) + \Omega_i \quad (1)$$

La cantidad  $f_i$  es la densidad de partículas que viajan a una velocidad  $\vec{c}_i$  al instante de tiempo  $t$  en el nodo  $x$  de una láctice cúbica.

El operador *Bhatnagar-Gross-Krook* (**BGK**)<sup>(1)</sup> se utiliza para el término de colisión que aparece en la parte derecha de la ecuación (1)

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (2)$$

Este operador describe el paso de *colisión* en el que la distribución  $f_i$  relaja hacia la distribución de equilibrio  $f_i^{eq}$  a un ritmo  $\frac{1}{\tau}$ . Se denomina tiempo de relajación a  $\tau$ . Después la distribución  $f_i$  se *propaga* al nodo  $x + \vec{c}_i$ .

### 3. Granos

En *Ludwig* los objetos sólidos son definidos por una superficie que corta algunos enlaces entre nodos de la láctice. En la frontera sólido-fluido se aplica el esquema **BBL** (*bounce-back on the links*)<sup>(5)</sup> de forma que se obtienen condiciones de frontera *stick*. Así los granos pueden ser modelados por esferas duras de radio  $r$ , en contacto con el fluido, entre las cuales no se tiene en cuenta ninguna interacción excepto las colisiones.

Las velocidades después de cada colisión entre dos partículas se obtiene de la siguiente forma<sup>(2)</sup>:

$$\vec{v}_1^f = \vec{v}_1 - \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (1 + \varepsilon) (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e} \quad (3)$$

$$\vec{v}_2^f = \vec{v}_2 + \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (1 + \varepsilon) (\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}) \vec{e} \quad (4)$$

donde  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$  y  $\vec{e}$  es un vector unitario en la dirección de la línea que conecta los centros de las partículas.

El coeficiente de restitución  $\varepsilon = -\frac{\vec{v}_{12}^f \cdot \vec{e}}{\vec{v}_{12}^i \cdot \vec{e}}$  mide la pérdida de energía en cada choque, lo consideraremos constante e independiente de la velocidad relativa entre partículas.  $\varepsilon$  varía entre 0 (colisión totalmente inelástica) y 1 (colisión totalmente elástica)

## 4. Resultados

A modo de verificación se realizaron diversas simulaciones del comportamiento de una partícula dentro de un fluido en una caja. La desviación del coeficiente de fricción  $\zeta$  de su valor teórico  $\zeta_0 = 6\pi\eta_0 r$ , debido al efecto de tamaño finito, se puede calcular como una función de  $\phi$ <sup>(4)</sup>.

$$\left(\frac{\zeta}{\zeta_0}\right)^{-1} = 1 - 1,7601\phi^{\frac{1}{3}} + \phi - \dots \quad (5)$$

Teniendo en cuenta la corrección anterior podemos comprobar que la partícula tiene un comportamiento similar al descrito por ley de Stokes (figura 2).

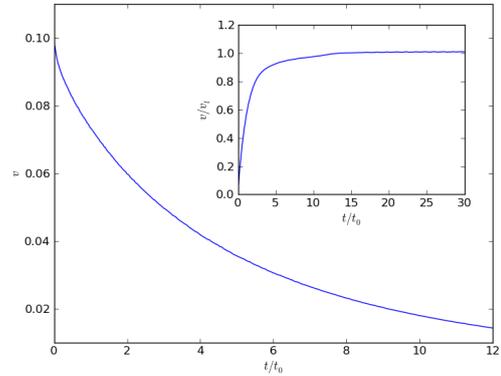


Figura 2: Efecto de la disipación de energía en la velocidad de una partícula de radio  $r = 2,5$  aislada.  $t_0 = \frac{r}{v_m}$ , donde  $v_m$  es la velocidad media. inset: Velocidad de una partícula sobre la que se aplica una fuerza constante  $F$ .  $t_0 = \frac{r}{v_l}$ , donde  $v_l = \frac{F}{\zeta}$

En las figuras 3 y 4 se muestran las velocidades de dos partículas que inicialmente tienen una velocidad de igual magnitud pero de sentido contrario  $v_1 = 0,1$  y  $v_2 = -0,1$ , sin que actúe ninguna fuerza externa sobre ellas. Después de desplazarse un tiempo colisionan de manera frontal.

En el primer caso el choque es elástico  $\varepsilon = 1,0$  y la magnitud de la velocidad relativa con que se mueven las partículas no varía, lo que existe es un intercambio entre los valores de las velocidades verificable en la gráfica correspondiente.

En el segundo el coeficiente de restitución es  $\varepsilon = 0,2$  y por lo tanto hay disipación de energía adicional durante el choque. Al calcular  $\varepsilon$  a partir de los resultados de esta simulación obtenemos que  $\varepsilon = 0,184 \approx 0,2$

En ambos casos el comportamiento está cerca del esperado teóricamente.

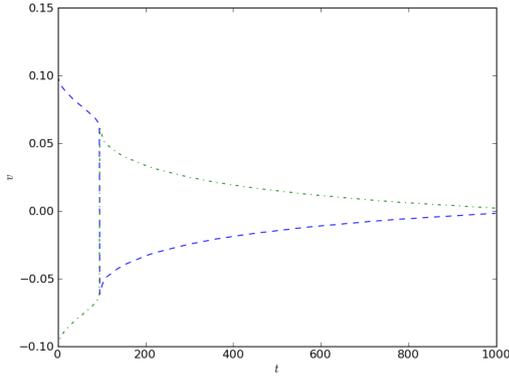


Figura 3: Velocidad de dos partículas que se mueven una al encuentro de la otra en un choque elástico

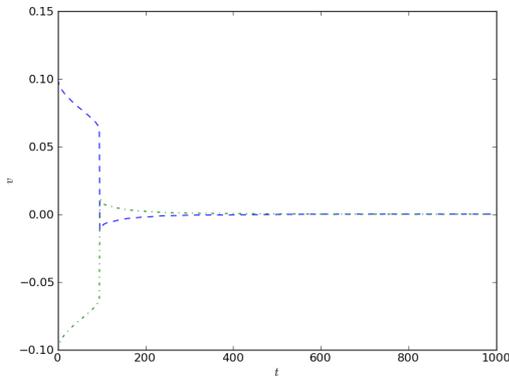


Figura 4: Velocidad de dos partículas que se mueven una al encuentro de la otra en un choque inelástico con  $\varepsilon = 0,2$ . Al reconstruir el valor del coeficiente de restitución a partir de los valores que se muestran en la figura se obtiene  $\varepsilon = 0,184 \approx 0,2$

#### 4.1. Sistema homogéneo forzado fuera del equilibrio

Para compensar la pérdida de energía del medio granular, debido a la interacción con el fluido y al carácter inelástico de las colisiones, se aplicó una fuerza externa aleatoria de forma que a cada partícula se le da un impulso a una frecuencia determinada. De esta forma se logra que el sistema llegue a un *estado estacionario fuera del equilibrio* (**EEFE**) en presencia de esta fuerza aleatoria.

En sistemas densos ( $\phi = 0,6$ ), para valores pequeños del coeficiente de restitución, los granos tienden a acoplarse y formar clústeres, como se puede apreciar en la gráfica de la función de distribución radial (figura 5). Para colisiones elásticas,  $\varepsilon = 1,0$ , la  $g(r)$  presenta una estructura más marcada característica de un sólido. Además la temperatura media (figura 7) aumenta con el valor de  $\varepsilon$  siguiendo una ley de potencia simi-

lar al resultado obtenido por van Noije, Ernst, Trizac & Pagonabarraga<sup>(8)</sup> para fluidos granulares, aunque con un exponente distinto. El coeficiente de difusión también aumenta con  $\varepsilon$  (figura 8), pero no se verifica la ecuación de *Stokes-Einstein*  $D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$ .

En cambio, para valores pequeños de la fracción volúmica  $\phi$  no se observa diferencia en el comportamiento del medio al variar  $\varepsilon$  (ver figura 9), excepto en el valor del máximo, que es mayor para valores menores del coeficiente de restitución, indicando una tendencia al acoplamiento entre granos a medida que son más inelásticas las colisiones. En este caso el régimen hidrodinámico controla la evolución del sistema.

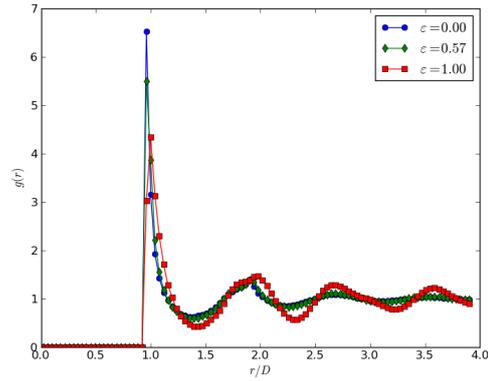


Figura 5: Función de distribución radial  $g(r)$  para  $\phi = 0,6$ .  $D = 5,1$  es el diámetro de las partículas

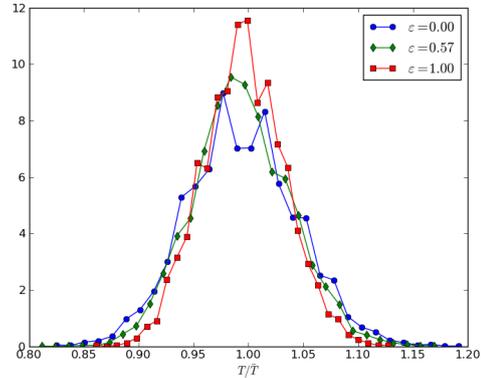


Figura 6: Función de distribución de la temperatura granular para los mismos datos representados en la figura 5

#### 4.2. Microreología

Otra situación que se simuló fue un sistema en el cual se seleccionó una partícula y se le aplicó una fuerza constante hasta que igualmente se llegó a un **EEFE**. La distribución de velocidades muestra una desviación

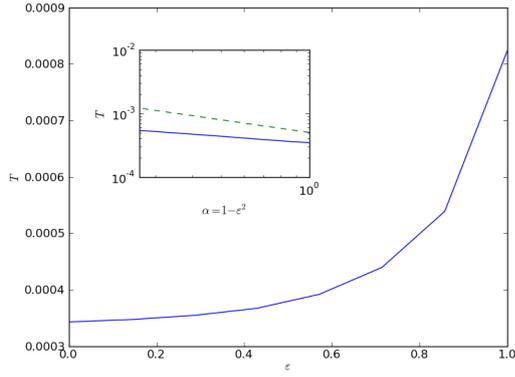


Figura 7: Temperatura granular  $T$  como función del coeficiente de restitución  $\varepsilon$ . Inset: Gráfica de  $T$  en función del coeficiente de inelasticidad  $\alpha = 1 - \varepsilon^2$ . En línea discontinua se muestra el resultado para un fluido granular.  $\phi = 0,6$ ,  $D = 5,1$

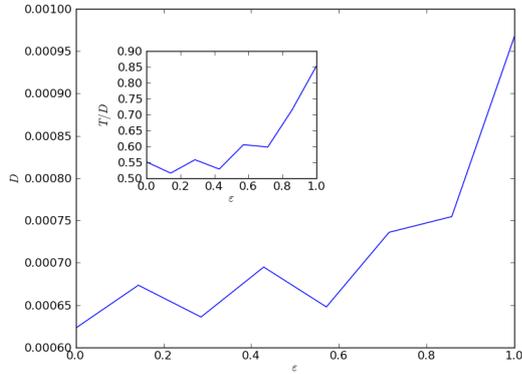


Figura 8: Coeficiente de difusión  $D$  como función del coeficiente de restitución  $\varepsilon$ . Inset: Gráfica de  $\frac{T}{D}$  en función del coeficiente de restitución  $\varepsilon$ .  $\phi = 0,6$ ,  $D = 5,1$

de la distribución de *Maxwell* que es la esperada para la velocidad de un gas ideal.

Se observó que para fracciones volúmicas pequeñas, en este caso  $\phi = 0,1$  (figuras 10), el comportamiento de la velocidad de la partícula no depende apreciablemente del coeficiente de restitución. En el caso elástico, la distribución de velocidades no es simétrica, estando más separado el valor mínimo de la velocidad de la partícula de su valor medio.

Sí existe una marcada diferencia al variar  $\varepsilon$  cuando es mayor la densidad de partículas en la caja de la simulación (figura 11). La gráfica de la distribución de la velocidad para  $\varepsilon = 1,0$  es más dispersa, aparecen dos picos, y es simétrica respecto al valor medio. Al ser las colisiones elásticas, la partícula seleccionada impone una velocidad en las partículas con las que choca, a su vez este movimiento de granos alrededor hace que

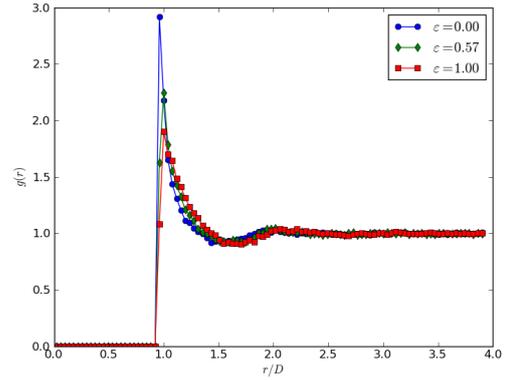


Figura 9: Función de distribución radial  $g(r)$  para  $\phi = 0,2$ .  $D = 5,1$  es el diámetro de las partículas

sea más variado el efecto del fluido y de las colisiones sobre la partícula que se analiza. Cuando las colisiones son inelásticas,  $\varepsilon = 0,0$ , el movimiento generado por los choques sobre los granos que se encuentran en la trayectoria de la partícula que se hala, es enfriado y se tiende a crear un defecto en la estructura del medio en el cual halla una resistencia menos variada.

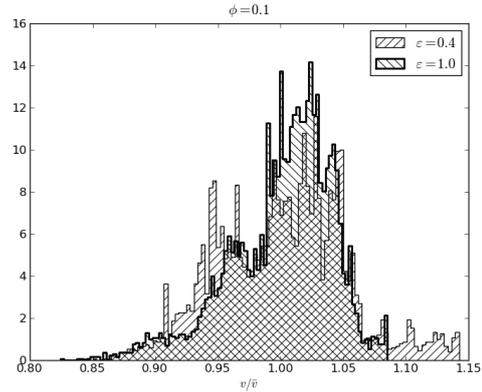


Figura 10: Distribución de velocidad de una partícula a la que se le aplica una fuerza constante en un sistema a  $\phi = 0,1$

## 5. Conclusiones preliminares y trabajo futuro

En este trabajo se utilizó el método de *Lattice-Boltzmann* para simular un fluido que contiene dentro esferas duras con las cuales se modela un medio granular sin despreciar la interacción con el fluido. Con este objetivo se le añadió un código que permite tener en cuenta las colisiones inelásticas entre las partículas al programa *Ludwig* escrito en el lenguaje de programación **C**. Las simulaciones fueron realizadas en el

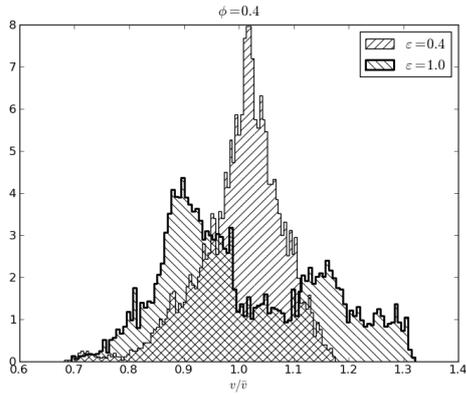


Figura 11: Distribución de velocidad de una partícula a la que se le aplica una fuerza constante en un sistema a  $\phi = 0,4$

Cluster de cálculo Albeniz formado por 8 nodos que pertenece al Departamento de Física Fundamental en la Facultad de Física de la Universidad de Barcelona.

Se ha podido verificar que la inclusión de las interacciones fluido-grano varían el comportamiento respecto a medios granulares secos, por lo que no se pueden aplicar directamente resultados analíticos obtenidos para estos<sup>(8)</sup>.

En los resultados obtenidos observamos una tendencia a la formación de clústeres cuando las colisiones entre partículas son inelásticas. Para comprobar este comportamiento se realizarán simulaciones en paralelo con las que se pueda estudiar sistemas más grandes que permitan tener una mejor visión de la estructura del medio.

En el caso del estudio de microreología se debe profundizar en la estructura local alrededor de la partícula sobre la que se aplica la fuerza, verificar el estado del fluido y de los granos vecinos a esta para entender mejor como condicionan su movimiento. También se debe medir el coeficiente de fricción efectivo  $\gamma$ , que se define como  $\mathbf{F} = \gamma \mathbf{U}$ , donde  $\mathbf{U}$  es la velocidad media de la partícula y  $\mathbf{F}$  es la fuerza media que se aplica sobre esta, algunos resultados<sup>(9)</sup> relacionan estas magnitudes.

## Referencias

- BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P. & KROOK, M. 1954 A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* **94** (3), 511–525.
- BRIANTOV, N. V. & PÖSCHEL, T. 2004 *Kinetic Theory of Granular Gases*. Oxford University Press.
- DESPLAT, J.-C., PAGONABARRAGA, I. & BLANDON, P. 2001 Ludwig: A parallel lattice-boltzmann code for

complex fluids. *Computer Physics Communications* **134**, 273–290.

LADD, A. J. C. 1988 Hydrodynamic interactions in a suspension of spherical particles. *The Journal of Chemical Physics* **88**, 5051–5063.

LADD, A. J. C. & NGUYEN, N.-Q. 2002 Lubrication corrections for lattice-boltzmann simulation of particles suspensions. *Phys. Rev.* **66**.

MEYER, A., MARSHALL, A., BUSH, B. G. & FURST, E. M. 2006 Laser tweezer microrheology of a colloidal suspension. *Journal of Rheology* **50** (1), 77–92.

MÖBIUS, M. E., CHENG, X., KAREZMAR, G. S., NAGEL, S. R. & JAEGER, H. M. 2004 Intruders in the dust: Air-driven granular size separation. *Physical Review Letters* **93**.

VAN NOIJE, T. P. C., ERNST, M. H., TRIZAC, E. & PAGONABARRAGA, I. 1999 Randomly driven granular fluids: Large-scale structure. *Physical Review* **59**, 4326–4341.

SQUIRES, T. & BRADY, J. 2004 A simple paradigm for active and nonlinear microrheology. *APS Meeting Abstracts* pp. 2–+.