

## DE LA PARTÍCULA AL CONTINUO: CONSTRUCCIÓN DE CAMPOS A PARTIR DE SIMULACIONES DEM

### FROM PARTICLES TO THE CONTINUUM: MAPPING DEM SIMULATIONS TO EULERIAN FIELDS

Juan Cruz Catalano<sup>a,b</sup>, César M. Venier<sup>a,c</sup>, César I. Pairetti<sup>a,c,d</sup> y Santiago Márquez  
Damian<sup>b,e</sup>

<sup>a</sup>Universidad Nacional de Rosario, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Escuela de Ingeniería Mecánica, Rosario, Argentina

<sup>b</sup>Centro de Investigaciones en Métodos Computacionales (UNL -CONICET), Colectora Ruta Nacional N° 168, km 0, Paraje El Pozo (3000) Santa Fe, Argentina

<sup>c</sup>IFIR Instituto de Física de Rosario (UNR, CONICET), Rosario, Argentina

<sup>d</sup>Sorbonne Université and CNRS, UMR 7190, Institut Jean Le Rond d'Alembert, 75005 Paris, France

<sup>e</sup>Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Santa Fe, Santa Fe, Argentina

**Palabras clave:** Medios granulares, DEM, Promediado espacial.

**Resumen.** La simulación de medios granulares en fase densa mediante partículas resulta costoso computacionalmente a escala industrial. Por ello, se recurre a modelos continuos que describen el comportamiento macroscópico del material a partir de leyes reológicas. Para ajustar estos modelos, es necesario contar con datos confiables que capturen las interacciones a nivel de grano. Las simulaciones con el Método de Elementos Discretos (DEM) permiten obtener esta información a escala de laboratorio, pero sus resultados se expresan en propiedades y variables asociadas a las partículas, las cuales deben ser transformadas en campos del continuo. En este trabajo se presenta un código que implementa técnicas de promediado espacial para convertir resultados lagrangianos de simulaciones DEM en campos continuos definidos sobre una malla euleriana. Asimismo, se presentan casos simples que demuestran la capacidad para extraer información útil que permite calibrar y validar dichos modelos continuos.

**Keywords:** Granular media, DEM, Spatial averaging

**Abstract.** Simulating dense-phase granular media using particles is computationally expensive on an industrial scale. For this reason, continuous models based on rheological laws are used to describe the macroscopic behaviour of the material. To adjust these models, reliable data capturing interactions at the grain level is required. Simulations using the Discrete Element Method (DEM) can provide this information on a laboratory scale, but the results are expressed in terms of particle properties and variables, which must be transformed into continuous fields. This paper presents a code that implements spatial averaging techniques to convert the results of DEM simulations from a Lagrangian perspective into continuous fields defined on an Eulerian mesh. Simple cases are also presented to demonstrate the ability to extract useful information for calibrating and validating these continuous models.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los medios granulares se pueden encontrar en diversas aplicaciones industriales y en sistemas naturales. Algunos ejemplos de este tipo son el transporte de semillas, la descarga de silos y el desmoronamiento de rocas en la montaña. En todos estos casos, el abordaje con modelos matemáticos simplificados no es suficiente y las simulaciones computacionales son prioritarias para estudiar con profundidad todos estos casos. No obstante la descripción matemática de estos medios presenta dificultades, algunas de ellas son la gran cantidad de partículas involucradas con sus complejidades en la interacción, son medios en los que se disipa rápidamente la energía debido a las colisiones y en un mismo problema se puede notar que el medio granular se asemeja a un sólido, líquido o gas en función de su concentración (Andreotti et al., 2013).

Las simulaciones por medio del método de elementos discretos (DEM, por sus siglas en inglés), presentado por Cundall y Strack (1979), modela las interacciones entre partículas por medio de una interpenetración entre ellas. Actualmente, este método permite realizar simulaciones confiables de medios granulares con la limitación de que el costo computacional incrementa rápidamente a medida que se contempla una mayor cantidad de partículas. Estos altos costos computacionales dificultan la posibilidad de abordar problemas a escala real, desde este punto es que surgen teorías que ya no modelan cada interacción entre partículas, sino que describen al medio granular en términos eulerianos, es decir, mediante campos continuos. La Teoría Cinética de Flujos Granulares (KTGF, por sus siglas en inglés), fue presentada por Jenkins y Savage (1983) y Lun et al. (1984). Esta teoría surge de un desarrollo similar a la teoría cinética molecular clásica, siendo válida para medios granulares muy diluidos. Un enfoque diferente fue presentado por Jop et al. (2006) para flujos granulares en fase densa, el modelo propone una ley reológica para el medio granular basada en un número inercial,  $I$ . Estos modelos son útiles cuando el comportamiento del medio granular se asemeja a un líquido (Venier et al., 2021a,b).

Tanto en la KTGF como en los modelos friccionales, es necesario ajustar parámetros del medio granular para obtener resultados confiables. Estos parámetros de ajustes pueden obtenerse con simulaciones DEM, pero los resultados lagrangianos deben ser trabajados para que sean comparables con los modelos eulerianos. En este aspecto es que toman relevancias las técnicas de promediado espacial desarrolladas en primera instancia por Glasser y Goldhirsch (2001); Goldenberg y Goldhirsch (2002); Goldhirsch (2010) y continuadas en la última década por Weinhart et al. (2012, 2013). Bhateja y Khakhar (2020); Gu et al. (2019) presentan aplicaciones concretas de estas estrategias para la construcción de leyes reológicas y validación de KTGF y propuesta para contemplar efecto cohesivos.

En este trabajo realizamos una implementación en *python3* de las estrategias de promediado espacial. Esta herramienta fue diseñada para incorporar como datos de entrada los resultados de simulaciones DEM de OPENFOAM® (OpenCFD Ltd./ESI Group, 2023)..

## 2. METODOLOGÍA Y MARCO TEÓRICO

### 2.1. Método de Elementos Discretos

En el presente trabajo se emplea el solver *icoUncoupledKinematicParcelFoam*, en el cual se encuentra implementado el método DEM de Cundall y Strack (1979) con las modificaciones propuestas por Tsuji et al. (1992). Una partícula perteneciente a un medio granular puede presentar dos tipos de movimiento: translacional y rotacional. Durante el desarrollo de estos movimientos, las partículas interactúan con sus vecinas o con las paredes a través de colisiones y fuerzas de fricción. En las simulaciones DEM, dichas trayectorias se determinan mediante la integración de la segunda ley de Newton, ver Ec. (1). Siendo  $\mathbf{U}_\alpha$  y  $\boldsymbol{\omega}_\alpha$  la velocidad lineal y

angular de la partícula  $\alpha$ , respectivamente.

$$m_\alpha \frac{d\mathbf{U}_\alpha}{dt} = \sum_{\beta=1}^{n_\alpha^c} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^c + \mathbf{F}_\alpha^g \quad ; \quad I_\alpha \frac{d\boldsymbol{\omega}_\alpha}{dt} = \sum_{\beta=1}^{n_\alpha^c} \mathbf{M}_{\alpha\beta}^c \quad (1)$$

Los términos  $\mathbf{F}_{\alpha\beta}^c$  y  $\mathbf{M}_{\alpha\beta}^c$  corresponden a la fuerza y al momento de contacto ejercidos por la partícula  $\beta$  sobre la partícula  $\alpha$ . A su vez,  $m_\alpha$  e  $I_\alpha$  denotan la masa y el momento de inercia de la partícula  $\alpha$ . Finalmente,  $n_\alpha^c$  indica el número de contactos asociados a la partícula  $\alpha$ .

Cabe destacar que los problemas analizados en este trabajo no cuentan con un fluido interpartícula. Las partículas se asumen perfectamente rígidas, esféricas y de densidad uniforme. La gravedad es la única fuerza externa actuante ( $\mathbf{F}_\alpha^g = V_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} = \frac{1}{6} d_\alpha^3 \pi \rho_\alpha \mathbf{g}$ ). Donde  $V_\alpha$ ,  $d_\alpha$  y  $\rho_\alpha$  representan el volumen, el diámetro y la densidad de la partícula  $\alpha$ .

La esencia de DEM es permitir una interpenetración,  $\delta$ , entre las partículas rígidas. A partir de esta hipótesis, se propone un modelo para calcular las fuerzas de contacto en función de dicha interpenetración. En el modelo resorte–deslizador–amortiguador, el resorte representa la recuperación elástica del contacto, el amortiguador modela las pérdidas asociadas a la inelasticidad de la colisión y el deslizador actúa cuando existe deslizamiento dinámico entre partículas.

Cuando dos partículas entran en contacto se produce una deformación local que genera un área de interacción, sobre la cual se distribuyen fuerzas que pueden descomponerse en dos componentes: una normal y otra tangencial al plano de contacto,  $\mathbf{F}_{\alpha\beta}^c = \mathbf{F}_{n;\alpha\beta}^c + \mathbf{F}_{t;\alpha\beta}^c$ .

La teoría de contacto hertziana (Tsuji et al., 1992) establece que la componente normal de la fuerza de contacto varía con la potencia 3/2 de la interpenetración normal,  $|\delta_n| = \frac{1}{2} (d_\alpha + d_\beta) - |\mathbf{p}_\alpha - \mathbf{p}_\beta|$ , siendo  $\mathbf{p}_\alpha$  y  $\mathbf{p}_\beta$  la posición de las partículas  $\alpha$  y  $\beta$ . Mientras que la fuerza de contacto normal se expresa en la Ec. (2).

$$\mathbf{F}_{n;\alpha\beta}^c = (-k_n |\delta_n|^{3/2} - \eta_n \mathbf{U}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (2)$$

Donde  $k_n$  es la constante de rigidez del resorte y  $\eta_n$  la constante de amortiguamiento, ambas calculadas según lo propuesto en Tsuji et al. (1992). Por su parte,  $\mathbf{U}_{\alpha\beta}$  representa la velocidad relativa entre las partículas  $\alpha$  y  $\beta$ , definida como  $\mathbf{U}_{\alpha\beta} = \mathbf{U}_\alpha - \mathbf{U}_\beta$ .

En el modelo de fricción de Amontons–Coulomb, la fuerza de rozamiento permanece indeterminada mientras no exista deslizamiento entre las superficies de contacto. Por ello, para la componente tangencial de la fuerza se adopta un modelo resorte–amortiguador lineal en ausencia de deslizamiento relativo, y se aplica el modelo de fricción de Coulomb cuando las partículas comienzan a deslizarse entre sí. Ver Ec. (3).

$$\mathbf{F}_{t;\alpha\beta}^c = \begin{cases} (-k_t |\delta_t| - \eta_t \mathbf{U}_{t;\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} & \text{si } |\mathbf{F}_{t;\alpha\beta}^c| \leq \mu |\mathbf{F}_{n;\alpha\beta}^c|, \\ -\mu |\mathbf{F}_{n;\alpha\beta}^c| \frac{\mathbf{U}_{t;\alpha\beta}}{|\mathbf{U}_{t;\alpha\beta}|} & \text{si } |\mathbf{F}_{t;\alpha\beta}^c| > \mu |\mathbf{F}_{n;\alpha\beta}^c|. \end{cases} \quad (3)$$

Donde  $\mu$  es el coeficiente de fricción,  $k_t$  la rigidez del resorte tangencial, y  $\eta_t$  el coeficiente de amortiguamiento tangencial (en OPENFOAM® se asume igual al normal). El término  $\delta_t$  representa la interpenetración tangencial, la cual se acumula en el tiempo hasta que la fuerza resultante supera el límite impuesto por la fricción.  $\mathbf{U}_{t;\alpha\beta}$  es la velocidad relativa tangencial, calculada con la Ec. (4). Con dicha fuerza se calcula el momento de contacto  $\mathbf{M}_{\alpha\beta}^c$  según la Ec. (5). Siendo  $r_\alpha$  y  $r_\beta$  los radios de las partículas  $\alpha$  y  $\beta$  respectivamente.

$$\mathbf{U}_{t;\alpha\beta} = \mathbf{U}_{\alpha\beta} - (\mathbf{U}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (r_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha - r_\beta \boldsymbol{\omega}_\beta) \times \mathbf{n} \quad (4)$$

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^c = \sum_{\beta=1}^{n_\alpha^c} r_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha - \mathbf{p}_\beta}{|\mathbf{p}_\alpha - \mathbf{p}_\beta|} \times \mathbf{F}_{t;\alpha\beta}^c \quad (5)$$

## 2.2. Promediado espacial

El objetivo de estas técnicas de promediado es recuperar campos continuos partiendo desde la dinámica microscópica de las partículas. Estas técnicas fueron desarrolladas por [Glasser y Goldhirsch \(2001\)](#); [Goldenberg y Goldhirsch \(2002\)](#); [Goldhirsch \(2010\)](#) en la cuál se propone una función de convolución,  $\mathcal{G}(\mathbf{x})$  (siguiendo la notación propuesta por [Andreotti et al. \(2013\)](#), donde  $\mathbf{x}$  puede ser cualquier punto del dominio). Dicha función debe ser semidefinida positiva, su integral sobre todo el dominio debe ser uno y debe tener un único máximo en 0.

Haciendo uso de esta función y considerando un empaquetamiento de  $N$  partículas, todas con la misma masa  $m$ , cuya posición y velocidad del centro de masa se definen como  $\mathbf{x}^\alpha(t)$  y  $\mathbf{u}^\alpha(t)$ . Se puede definir la densidad,  $\rho(\mathbf{x}, t)$ , y el momento lineal,  $\rho\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , del medio como:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \sum_{\alpha=1}^N \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) \quad (6)$$

$$\rho\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = m \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{u}^\alpha(t) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) \quad (7)$$

Con el fin de encontrar una expresión para el tensor de tensiones del medio,  $\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t)$ , se deriva temporalmente la definición de momento lineal para el medio granular, ver Ec. (8), y se plantea el balance de momento lineal para un medio continuo, ver Ec. (9).

$$\frac{\partial \rho u_i(x, t)}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^N m u_i^\alpha(t) u_j^\alpha(t) \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N m \frac{du_i^\alpha(t)}{dt} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) \quad (8)$$

$$\left( \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (9)$$

Al substraer la Ec. (9) a la Ec. (8) se obtiene una expresión para la divergencia del tensor de tensiones, ver Ec. (10). La misma resulta de la adición de dos términos, el primero esta relacionado con la fluctuación de la velocidad de las partículas y el segundo con la fuerzas de contacto entre partículas.

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j - \sum_{\alpha=1}^N m u_i^\alpha(t) u_j^\alpha(t) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha))}_{=\frac{\partial \sigma_{ij}^k}{\partial x_j}} + \underbrace{\sum_{\alpha=1}^N m \left( \frac{du_i^\alpha}{dt} - g_i \right) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t))}_{=\frac{\partial \sigma_{ij}^c}{\partial x_j}} \quad (10)$$

El primer término se encuentra escrito como una divergencia, con lo cual se recupera directamente una expresión para la contribución cinética al tensor de tensiones, Ec. (11).

$$\sigma_{ij}^k = \rho u_i u_j - \sum_{\alpha=1}^N m u_i^\alpha(t) u_j^\alpha(t) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha) \quad (11)$$

En el caso de la contribución colisional, se deben realizar manipulaciones algebraicas para expresar el término en forma de divergencia. El primer paso consiste en aplicar la segunda ley de Newton a la partícula arbitraria  $\alpha$ , donde  $f_i^{\alpha\beta}$  denota la fuerza ejercida por la partícula  $\beta$  sobre  $\alpha$  (Ec. 12).

$$m \frac{du_i^\alpha}{dt} = mg_i + \sum_\beta f_i^{\alpha\beta}(t) \quad (12)$$

Con la segunda y tercera ley de Newton, se reescribe el segundo término de la Ec. (10) como:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^c(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_i^{\alpha\beta} (\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) - \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t))) \quad (13)$$

Las identidades Ec. (14) y Ec. (15) son validas para cualquier función suave, siendo  $s \in [0, 1]$  un parámetro auxiliar que interpola linealmente entre las posiciones de las partículas  $\alpha$  y  $\beta$ .

$$\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) - \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t)) = - \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t) + s\mathbf{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial s} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t) + s\mathbf{x}^{\alpha\beta}(t)) = x_j^{\alpha\beta}(t) \frac{\partial}{\partial x_j} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t) + s\mathbf{x}^{\alpha\beta}(t)) \quad (15)$$

Aplicando dichas identidades a Ec. (13) se puede reescribir el segundo término de la Ec. (10) como divergencia, tal como se muestra en Ec (16).

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^c(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_i^{\alpha\beta} x_j^{\alpha\beta} \int_0^1 \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t) + s\mathbf{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \right] \quad (16)$$

Finalmente, podemos escribir una expresión para el tensor de tensiones (a partir de las posiciones, velocidades y fuerzas de las partículas) como una suma de dos contribuciones una cinética y una por contacto entre partículas,  $\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = \sigma_{ij}^k(\mathbf{x}, t) + \sigma_{ij}^c(\mathbf{x}, t)$ .

Trabajando algebraicamente la Ec. (11) y considerando a la fluctuación de la velocidad de la partícula  $\alpha$  como la diferencia entre la velocidad de la partícula y la velocidad del campo homogeneizado ( $u_i'^\alpha = u_i^\alpha(t) - u_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha)$ ). Se arriba a Ec. (17) para la contribución cinética. Mientras que de Ec. (16) se extrae la expresión Ec. (18) para la contribución por contacto.

$$\sigma_{ij}^k(\mathbf{x}, t) = - \sum_{\alpha=1}^N m u_i'^\alpha(t) u_j'^\alpha(t) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha(t)) \quad (17)$$

$$\sigma_{ij}^c(\mathbf{x}, t) = - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_i^{\alpha\beta} x_j^{\alpha\beta} \int_0^1 \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\beta(t) + s\mathbf{x}^{\alpha\beta}(t)) ds \quad (18)$$

El último aspecto a definir es la función de peso, la cual tiene una influencia débil en los resultados, siendo el parámetro clave el ancho  $w$  de dicha función (Weinhart et al., 2013). En este trabajo se emplea la función indicada en la Ec. (19), que adopta el valor  $1/V$  cuando la partícula se encuentra dentro de la región de promediado y cero en caso contrario.

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} H(w - |\mathbf{x}|) \quad (19)$$

Aplicando esta elección se obtiene la siguiente expresión para el tensor de tensiones.

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha \in V} m u_i'^{\alpha} u_j'^{\alpha} - \frac{1}{V} \sum_{c \in V} f_i^c b_j^c \quad (20)$$

La segunda sumatoria se da sobre todos los contactos  $c$  dentro del volumen  $V$ . El vector  $\mathbf{f}^c$  es el módulo de la fuerza entre las 2 partículas que están en el contacto  $c$ . Mientras que el vector  $\mathbf{b}^c$  es el vector que une los 2 centroides de las partículas  $\alpha$  y  $\beta$ .

En lo referente a la contribución de las paredes, [Weinhart et al. \(2012\)](#) propone incorporarla en la derivación original, considerando tres términos:  $\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = \sigma_{ij}^k(\mathbf{x}, t) + \sigma_{ij}^c(\mathbf{x}, t) + \sigma_{ij}^w(\mathbf{x}, t)$ . En este trabajo, cada contacto con las paredes se incluyó dentro de  $\sigma_{ij}^c$ , considerando que el vector  $\mathbf{b}_w^c = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_w^c$  conecta el centro de la partícula con el punto de contacto.

### 2.3. Implementación en código

La implementación del algoritmo de homogenización se realizó en *Python 3*. La filosofía adoptada en el desarrollo del código es que sea modular y portable a otras plataformas de simulación DEM. Para ello, se estructuró el programa en funciones independientes, de modo que la salida de cada una constituye la entrada de la siguiente. En la Fig. 1 se muestra un diagrama de flujo con las funciones principales que componen el código.

El esquema puede pensarse en cuatro niveles. El primero corresponde a la lectura de los datos, encontrándose dos funciones: `load_VTK()`, que lee la malla desde un archivo VTK mediante *pyvista* ([Sullivan y Kaszynski, 2019](#)), y `load_lagrangian_data()`, diseñada para importar todos los campos de interés escritos para la nube *kinematicCloud*. Esta última devuelve tres diccionarios: uno para las partículas, otro para los contactos entre partículas y un tercero para los contactos entre partículas y pared. Según el tipo de campo a importar, se implementaron funciones específicas que emplean el paquete *foamlib* ([Gerlero y Kler, 2025](#)), *NumPy* y expresiones regulares.

El segundo nivel agrupa los cálculos previos a proyectar los campos sobre la malla euleriana. Allí se incluyen dos funciones que recuperan las fuerzas internas entre partículas y entre partículas y pared, tal como las calcula OPENFOAM®. Previo a estas funciones, se obtiene el paso temporal directamente del archivo `log`, con el fin de contemplar los subpasos empleados por OPENFOAM® en el cálculo de fuerzas. Finalmente, una función de este nivel asigna a cada partícula y punto de contacto el identificador de la celda en la que se encuentran alojados.

El tercer nivel corresponde al cálculo y construcción de los campos continuos sobre la malla de *pyvista*. Por último, el cuarto nivel está compuesto por la función encargada de escribir los archivos de salida, que pueden visualizarse con herramientas de postproceso como *ParaView*.

## 3. RESULTADOS Y DISCUSIONES

### 3.1. Presentación casos

Se abordan dos casos de aplicación del algoritmo de promediado espacial: uno dinámico y otro estático. En la Fig. 2 se muestran las geometrías de ambos problemas. El primer caso corresponde a una rampa inclinada en la cual se posicionan las partículas según una distribución inicial predeterminada. En los límites verticales se imponen condiciones periódicas, de modo que las partículas que abandonan el dominio por el lado derecho reingresan por el izquierdo y las que abandonan el dominio por el frente ingresan por detrás, conservando sus variables cinemáticas. Estas condiciones de periodicidad en el eje  $z$  convierten la simulación en pseudo-2D. En la pared superior se aplica una condición tipo *patch*, que permite la salida libre de partículas, aunque la altura considerada es lo suficientemente grande como para evitar pérdidas

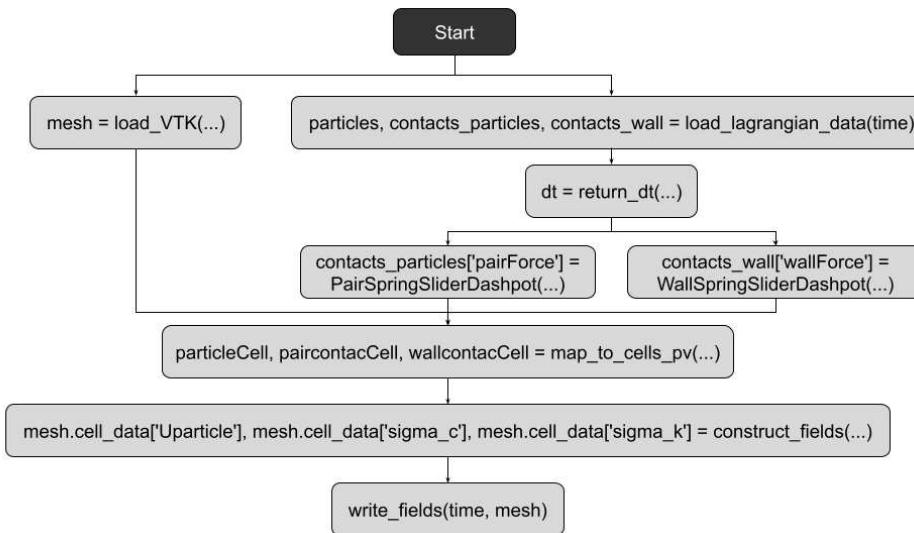


Figura 1: Diagrama de flujo de las funciones que se utilizan para homogeizar una simulación DEM en OPEN-FOAM®

de material. La pared inferior presenta un coeficiente de fricción  $\mu = 0,5$ , valor que también se adopta para las interacciones partícula–partícula. Este rozamiento detiene las partículas en la base y permite el desarrollo de un perfil de velocidad ascendente en la dirección vertical  $x$ . La gravedad se descompone en los dos ejes según  $\mathbf{g} = -9,81(\sin(21,5^\circ); \cos(21,5^\circ))$ .

El segundo caso corresponde a un silo en el cual las partículas son inyectadas desde una posición inicial y se dejan evolucionar bajo la acción de la gravedad hasta alcanzar el estado de reposo. La simulación es bidimensional, por lo tanto no se resuelven las ecuaciones para la coordenada  $z$ . Tanto en las paredes laterales y las interacciones entre partículas se establece un coeficiente de fricción  $\mu = 0,5$ .

### 3.2. Flujo en rampa

[Bhateja y Khakhar \(2020\)](#) presentan una solución analítica para el flujo en rampa pseudo-2D, donde el perfil de velocidades es proporcional a  $y^{3/2}$ . En la Fig. 3b se muestra el perfil de velocidades en una franja central de la geometría, tanto a partir de los datos obtenidos mediante DEM como de los valores calculados con el algoritmo de promediado espacial. La comparación entre ambas curvas revela un buen acuerdo, lo que confirma que el campo de velocidades se recupera correctamente a partir de las velocidades lagrangianas de las partículas.

Al igual que [Bhateja y Khakhar \(2020\)](#) los datos de ambas curvas se ajustan con la función  $f(y) = A(h^{3/2} - (h-y)^{3/2}) + U_{x;\min}$ , donde  $h$  es la altura de partículas. En ambos casos se observa una buena correlación con esta ley, destacándose el ajuste correspondiente a la velocidad promediada, para el cual se obtuvo un coeficiente de determinación  $R^2 = 99\%$  y un error cuadrático medio  $RMS = 0,12$  m/s. Estos resultados muestran que las técnicas de promediado espacial permiten reproducir adecuadamente el comportamiento físico esperado.

### 3.3. Silo estático

En la Fig. 4a se muestran los campos correspondientes a las componentes diagonales  $\sigma_{xx}^c$  y  $\sigma_{yy}^c$ , junto con el campo de presión  $P$ . Se observa que la componente  $\sigma_{yy}^c$  presenta una magnitud superior a la de  $\sigma_{xx}^c$ , lo que refleja la predominancia de los esfuerzos verticales sobre los horizontales esperable para este caso.

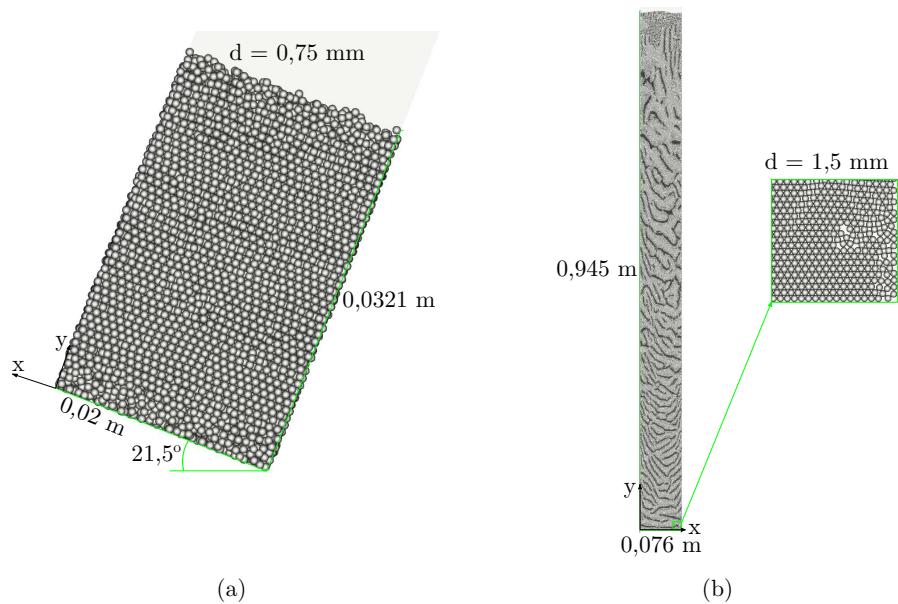


Figura 2: Características geométricas de los casos de estudio. (a) Caso de flujo en rampa y (b) silo estático

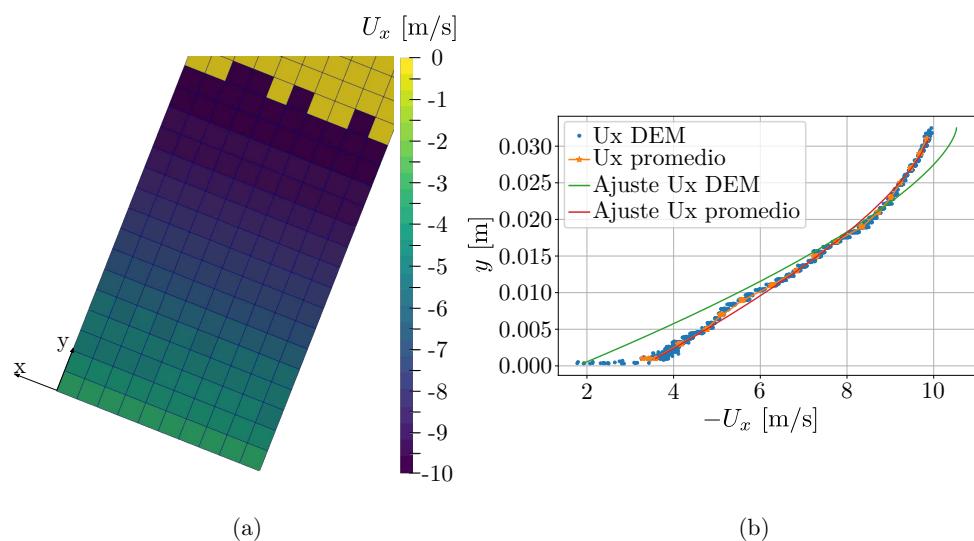


Figura 3: (a) Campo de velocidades  $x$  aplicando el algoritmo de promediado espacial (b) Perfil de velocidad  $x$  para DEM y campo promediado, con ajustes para ambos casos proporcionales a  $y^{3/2}$ .

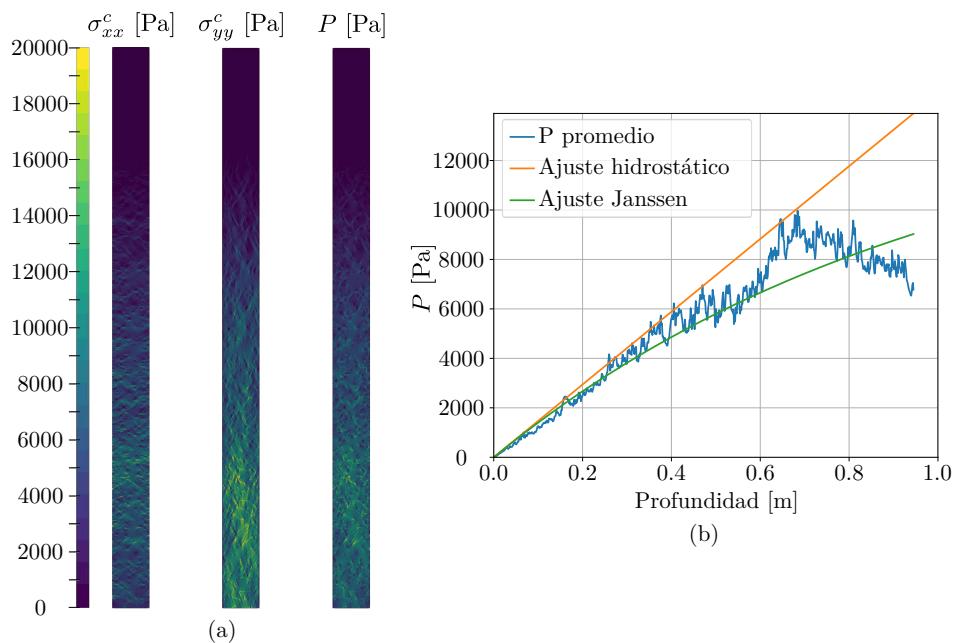


Figura 4: (a) Campos de la componente diagonales del tensor de tensiones colisional y de Presión calculado como  $P = 1/2(\sigma_{xx}^c + \sigma_{yy}^c)$ . (b) Presión promediada en función de la profundidad y ajuste tipo hidrostático y tipo Janssen.

En la Fig. 4b se muestra la presión promedio en función de la profundidad. El promedio se calculó sobre celdas que están a una misma altura. Inicialmente, la curva numérica muestra un buen ajuste con la ley hidrostática ( $P = \rho gy$ ), válida hasta aproximadamente 0,4 m de profundidad. A partir de este punto, la presión deja de crecer linealmente y comienza a desviarse del comportamiento hidrostático, mostrando una tendencia a la saturación compatible con el efecto Janssen, ver Ec. (21), donde parte del peso granular se transfiere a las paredes por fricción.

No obstante, los resultados obtenidos a partir de la simulación DEM muestran un leve decrecimiento de la presión a mayores profundidades, lo cual no es consistente con el comportamiento teórico esperado. Este efecto puede deberse a limitaciones de la propia simulación DEM, principalmente relacionadas con su carácter bidimensional (al no resolverse la coordenada  $z$ ) y con la falta de un promediado sobre distintas realizaciones del experimento.

$$P(y) = \rho g \lambda \cdot (1 - e^{-y/\lambda}) , \quad \lambda = W/(2 * \mu_w * K) \quad (21)$$

#### 4. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó en detalle una técnica que permite obtener campos continuos a partir de variables asociadas a cada partícula. Se implementó esta técnica en Python y se validaron con casos iniciales, los cuales muestran la potencialidad de la herramienta para trabajos futuros, como el ajuste de leyes reológicas. El marco teórico propuesto brinda la posibilidad de considerar interacciones más complejas entre partículas y de definir modelos más completos de manera sistemática. Una vez ajustada la reología para el sistema de interés, es posible cuantificar la precisión del modelo en configuraciones típicas, como los ejemplos propuestos.

#### AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a CONICET por el financiamiento de la Beca Interna Doctoral de Juan Cruz Catalano, a la Secretaría de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Provincia de Santa Fe y a la Secretaría de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional de Rosario. El trabajo utilizó recursos computacionales del cluster Pirayu, adquirido con fondos de la Agencia

Santafesina de Ciencia, Tecnología e Innovación, mediante el Proyecto AC-00010-18.

## REFERENCIAS

- Andreotti B., Forterre Y., y Pouliquen O. *Granular media: between fluid and solid*. Cambridge University Press, 2013. <http://doi.org/10.1017/CBO9781139541008>.
- Bhateja A. y Khakhar D.V. Analysis of granular rheology in a quasi-two-dimensional slow flow by means of discrete element method based simulations. *Physics of Fluids*, 2020. <http://doi.org/10.1063/1.5123714>.
- Cundall P.A. y Strack O.D. A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, 1979. <http://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>.
- Gerlero G.S. y Kler P.A. foamlib: A modern Python package for working with OpenFOAM. *Journal of Open Source Software*, 2025. <http://doi.org/10.21105/joss.07633>.
- Glasser B. y Goldhirsch I. Scale dependence, correlations, and fluctuations of stresses in rapid granular flows. *Physics of Fluids*, 2001. <http://doi.org/10.1063/1.1338543>.
- Goldenberg C. y Goldhirsch I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Physical review letters*, 2002. <http://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.084302>.
- Goldhirsch I. Stress, stress asymmetry and couple stress: from discrete particles to continuous fields. *Granular Matter*, 2010. <http://doi.org/10.1007/s10035-010-0181-z>.
- Gu Y., Ozel A., Kolehmainen J., y Sundaresan S. Computationally generated constitutive models for particle phase rheology in gas-fluidized suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 2019. <http://doi.org/10.1017/jfm.2018.856>.
- Jenkins J.T. y Savage S.B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of fluid mechanics*, 1983. <http://doi.org/10.1017/S0022112083001044>.
- Jop P., Forterre Y., y Pouliquen O. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 2006. <http://doi.org/10.1038/nature04801>.
- Lun C.K., Savage S.B., Jeffrey D., y Chepurniy N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of fluid mechanics*, 1984. <http://doi.org/10.1017/S0022112084000586>.
- OpenCFD Ltd./ESI Group. OpenFOAM. 2023. Versión v2312 del OpenFOAM open-source CFD toolbox.
- Sullivan B. y Kaszynski A. PyVista: 3D plotting and mesh analysis through a streamlined interface for the Visualization Toolkit (VTK). *Journal of Open Source Software*, 2019. <http://doi.org/10.21105/joss.01450>.
- Tsuji Y., Tanaka T., y Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder technology*, 1992. [http://doi.org/10.1016/0032-5910\(92\)88030-L](http://doi.org/10.1016/0032-5910(92)88030-L).
- Venier C., Binda L., Ramajo D., Damián S.M., Ippolito I., y Nigro N. The performance of the  $\mu$  (i)-rheology model on flat bottom silos discharge. En *EPJ Web of Conferences*. EDP Sciences, 2021a. <http://doi.org/10.1051/epjconf/202124903032>.
- Venier C.M., Marquez Damian S., Bertone S.E., Puccini G.D., Risso J.M., y Nigro N.M. Discrete and continuum approaches for modeling solids motion inside a rotating drum at different regimes. *Applied Sciences*, 2021b. <http://doi.org/10.3390/app112110090>.
- Weinhart T., Hartkamp R., Thornton A.R., y Luding S. Coarse-grained local and objective continuum description of three-dimensional granular flows down an inclined surface. *Physics of fluids*, 2013. <http://doi.org/10.1063/1.4812809>.
- Weinhart T., Thornton A.R., Luding S., y Bokhove O. From discrete particles to continuum fields near a boundary. *Granular Matter*, 2012. <http://doi.org/10.1007/s10035-012-0317-4>.