

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

MODELAGEM COMPUTACIONAL DA PENETRAÇÃO DE UMA FIBRA EM UM MEIO GRANULAR DENSO CONFINADO

Fabiola Fernandes de Oliveira¹ - fernandes.ffe@gmail.com

Allbens Atman Picardi Faria^{1,2,3} - atman@cefetmg.br

¹Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET/MG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

²Departamento de Física, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET/MG, Belo Horizonte, MG, Brasil

³Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Sistemas Complexos, INCT-SC.

Resumo. *Este trabalho trata-se de uma fase inicial de um projeto de simulação da penetração de uma raiz no solo, através do estudo da penetração de uma fibra em um meio granular denso confinado, usando a técnica de dinâmica molecular. O solo, como material granular, e a raiz, como uma estrutura biológica, podem ser considerados como um sistema fluido-estrutura e conhecer como essa interação acontece pode auxiliar no manejo do solo e de culturas, contribuindo tanto para a produção quanto para a estabilidade e qualidade do solo. Esta etapa inicial diz respeito a modelagem computacional da penetração de uma fibra em um sistema granular. A simulação, portanto, parte da geração de configurações iniciais do sistema, neste caso, uma caixa repleta de discos de diferentes diâmetros, uniformemente distribuídos. A caixa contém também um intruso representado por uma haste, preso em uma das extremidades. O modelo será importante para agregar às próximas etapas do projeto a fim de estudar o comportamento de uma raiz penetrando no solo e as forças que se desenvolvem no sistema.*

Palavras-chave: *Dinâmica molecular, Fluido-Estrutura, Elementos discretos, Material granular.*

1. INTRODUÇÃO

Um meio granular corresponde, basicamente, a um sistema composto por um amontoado de partículas macroscópicas, em que o movimento Browniano não é significativo. Duas características importantes dos materiais granulares são que a temperatura não influencia na dinâmica do sistema e a interação entre os grãos é dissipativa, em vista do atrito estático e das colisões inelásticas sucessivas. Além disso, o tamanho dos materiais granulares pode variar de microns até vários metros (Gennes, 1999; Magalhães, 2013; Rino, 2001).

Os materiais granulares tem propriedades peculiares e estão presentes em toda parte. O solo, por exemplo, como resultado de processos de intemperismo das rochas, é composto, em sua maior parte, por grãos de diferentes tamanhos, formatos e matéria orgânica.

Para caracterizar o comportamento de um sistema granular tem-se um dos parâmetros mais importantes, o *packing fraction*, que corresponde à fração de empacotamento do sistema, definindo seu comportamento físico observado. Se trata de uma grandeza adimensional, a fração do volume ocupado pelo volume total. Em função disso a matéria granular solta pode obter comportamento de fluidos, ao passo que sistemas densos podem se comportarem como sólidos (Sigaud, 2009).

Um meio granular denso com o comportamento fluidizado, portanto, é capaz de compor sistemas fluido-estrutura, que se baseiam na interação do meio granular com uma estrutura diferente deles. Como aplicação para esse tipo de estudo tem-se a mecânica dos solos, através do uso de raízes para a prevenção de movimentos de terras ou quanto ao desenvolvimento de vegetais que dependem do crescimento e expansão das raízes no solo (Algarra, 2016).

É comum a ocorrência de impactos no meio granular pela introdução de um objeto, tanto de forma natural ou artificial. O alongamento das raízes de um vegetal no solo, durante seu desenvolvimento compreende efeitos não-lineares na propagação das forças (Clark et al., 2015).

As características e propriedades do solo e das raízes são amplamente estudadas em seus campos de pesquisa, contudo, sobre essa interação fluido-estrutura que formam, pouco se sabe. Percebendo as condições e propriedades do solo e associando às informações sobre o comportamento das raízes é possível contribuir tanto para a produção rural quanto para a proteção do solo (Cordeiro et al., 2012; Batista et al., 2014).

O grau de compactação e a quantidade de água no solo são essenciais para o desempenho das culturas (Gubiani et al., 2008). Um dos indicadores do grau de compactação do solo é a resistência do solo à penetração (RP), que também é influenciada pela umidade (Moraes et al., 2011).

Compactação do solo corresponde a redução dos poros existentes, impedindo a passagem da raiz principal do vegetal. Então, como mecanismo de defesa da planta, crescem as raízes laterais com diâmetros suficientes para passarem pelos poros. Da mesma forma, quando essas raízes encontram obstáculos durante o crescimento e quando há impedância também às raízes laterais, a planta não se desenvolve por completo e as raízes ficam cobertas por pelos radiculares (Figura 1) (Camargo & Alleoni, 2006).

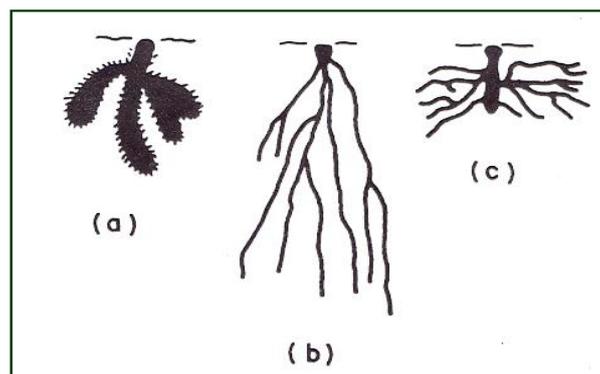


Figura 1- Efeito da compactação do solo nas raízes de um mesmo vegetal. (a) Com impedimento às raízes principal e laterais. (b) Sem impedimento. (c) Com impedimento à raiz principal (Camargo & Alleoni, 2006)

Estudar a resposta de um obstáculo submetido ao escoamento de um fluido corresponde a tentar compreender sua reologia (Algarra, 2016). Este trabalho, portanto, corresponde a uma

etapa inicial de um projeto para a simulação da penetração de uma raiz no solo por meio da dinâmica molecular, a partir do estudo de um sistema fluido-estrutura. A princípio faz-se o estudo com uma fibra rígida em um meio granular denso confinado e, a partir deste trabalho, será dada continuidade ao projeto que tem por base dados experimentais obtidos através dos testes realizados pelo grupo de Evelyne Kolb no LMDH (Université Paris-Sorbonne).

Logo, o objetivo deste trabalho é propor um modelo computacional inicial para simular o comportamento da raiz de uma planta penetrando o solo a partir da técnica de dinâmica molecular.

2. METODOLOGIA

Esta pesquisa parte do estudo experimental de Algarra (2016), o qual tomou-se por base para um modelo da interação de um meio granular com uma fibra, a fim de simular a penetração de uma raiz no solo. A técnica adotada para realizar a simulação de um sistema de duas dimensões foi a Dinâmica Molecular.

Na construção do modelo, para uma simulação em duas dimensões, considerou-se uma caixa preenchida de discos uniformes com espessura desprezível, desconsiderando a influência do meio intersticial. Neste momento, as forças atuantes são em função da movimentação da caixa em que estão confinados.

A elaboração do modelo foi realizada em dois momentos. No primeiro instante é gerada a configuração inicial do sistema e, no segundo, acontece a dinâmica molecular, resultante da interação entre as partículas. As duas etapas foram realizadas em códigos distintos, porém complementares.

A condição inicial do sistema corresponde na disposição dos discos na caixa, juntamente com o intruso — a fibra — de maneira uniforme. Ao ser aplicada a dinâmica molecular a configuração do sistema, então, fica determinada em função da posição e velocidade do centro de massa e pela velocidade angular em torno do centro de massa de cada partícula (Allen & Tildesley, 2017; Magalhães, 2013)

2.1 Dinâmica Molecular

A técnica de dinâmica molecular é determinística, estuda os movimentos físicos das partículas no tempo descrevendo um conjunto de soluções para as equações clássicas de movimento das partículas (Allen & Tildesley, 2017).

Levando em consideração que os grãos são tratados como um conjunto de discos sujeitos a forças newtonianas, as equações de movimento das partículas, então, são obtidas integrando a segunda lei de Newton junto a um modelo iterativo a fim de estudar a evolução do sistema de infinitos corpos (Sigaud, 2009; Magalhães, 2013).

Pode-se dizer que a dinâmica molecular se tornou uma ferramenta indispensável para simular vários processos da dinâmica dos materiais granulares, levando sempre em conta devidas precauções em relação ao tempo e escalas espaciais (Duran, 2012).

Dessa forma, segundo o princípio do método, são resolvidas, em etapas incrementais regulares, as equações que regem as mudanças no momento angular e linear da colisão das partículas (Duran, 2012). Portanto, para um sistema de N grãos, tem-se as seguintes equações:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij,x}, i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

$$m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = m_i g + \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij,y}, i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$I_i \frac{dw_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \tau_{ij}, i = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Os índices i e j representam cada par de partículas em contato. A posição das partículas é determinada pelas coordenadas do seu centro de massa, x_i e y_i , e w_i é a velocidade angular do grão. As variáveis m_i , I_i são, respectivamente, a massa, o momento angular de cada grão, a aceleração da gravidade g também é considerada constante. As coordenadas da força e torque resultantes da interação entre os grãos i e j são, respectivamente, $F_{ij,x}$, $F_{ij,y}$ e τ_{ij} . A aceleração de cada disco, dada pela segunda lei de Newton, é constante em cada passo de tempo.

A evolução das variáveis ocorre iterativamente e as equações de movimento são discretizadas. A cada passo de tempo (Δt), as coordenadas do centro de massa de cada disco e da sua velocidade angular (x_i , y_i e w_i) são atualizadas, isto é, essas variáveis, no instante $t - \Delta t$, são responsáveis pelos valores calculados no instante t . À vista disso, tendo a condição inicial do sistema é possível saber as condições nos tempos subsequentes e, assim a trajetória do sistema (Magalhães, 2013).

O algoritmo utilizado para realizar as iterações foi o *Velocity-Verlet*. É um método de integração numérica de equações de segunda ordem e é capaz de determinar a velocidade $v(t)$ ao mesmo tempo que a posição $r(t)$ (Figura 2) (Allen; Tildesley, 2017).

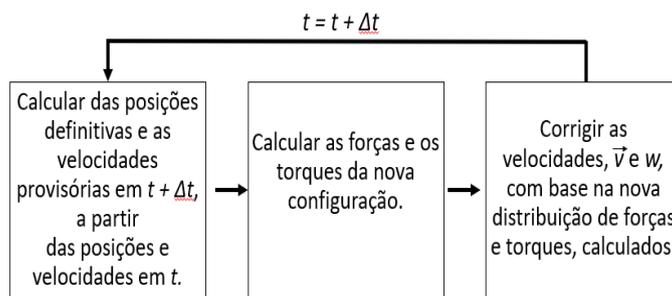


Figura 2- Fluxograma do algoritmo *Velocity-Verlet* (Magalhães, 2013) — Adaptado

Na modelagem, em cada passo de tempo discretizado, enquanto o limite de iterações ou o equilíbrio do sistema não é atingido, é feita a busca dos discos vizinhos. Essa busca, realizada em um raio máximo em torno de cada disco, incrementa uma *lista de Verlet* que é refeita a cada 100 iterações. Esse procedimento otimiza a simulação, realizando em menor custo computacional — $O(n^2)$ para a ordem $O(n \log n)$

Com base nas listas de vizinhos e nas novas posições são identificados possíveis contatos entre os discos para, então, uma lista de contatos ser construída. É realizado o cálculo de interpenetração no momento da colisão entre a partícula i e j .

As colisões entre os grãos são caracterizadas pela ocorrência de deformação elástica. Além da força elástica (\vec{f}_{el}), são consideradas as forças de atrito estático (\vec{f}_{ac}) e de amortecimento (\vec{f}_{am}). Sendo assim, a força (F_{ij}) e o torque (τ_{ij}) atuantes no grão i em interação com o grão j são:

$$\vec{F}_{ij} = \vec{f}_{el} + \vec{f}_{ac} + \vec{f}_{am} \quad (4)$$

$$\tau_{ij} = \vec{r} * \vec{F}_{ij} \quad (5)$$

A determinação do passo de tempo é arbitrária, porém extremamente importante por se tratar da simulação numérica de variáveis contínuas, em vista disso a solução será aproximada e haverá o acúmulo de erro no decorrer da simulação. Por isso, o critério para a escolha do tempo de discretização foi de que seu valor fosse muito menor do que o tempo de contato dos dois menores discos do sistema, isto é, do que o contato mais rápido.

3. RESULTADOS

O modelo da fibra no meio granular foi construído a partir das condições iniciais geradas e aplicadas à dinâmica molecular. Uma gravidade foi aplicada ao sistema, durante a dinâmica, a fim de fazer o movimento dos grãos em direção a fibra.

No momento da geração das condições iniciais foram determinados os tamanhos da caixa e dos discos, além da posição da fibra.

O arquivo de saída, após a dinâmica molecular é composto pelas coordenadas de cada partícula, seus respectivos raios, contatos e forças de reação, referentes ao último passo de tempo no sistema. Os dados do sistema fluido-estrutura durante e após a dinâmica puderam, então, ser convertidos a imagens que permitem ilustrar a evolução do sistema.

Três etapas foram ilustradas com o auxílio de um terceiro código, em linguagem C que gera uma imagem *.eps* (*encapsulated postscript*): caixa preenchida (condição inicial do sistema), durante a deposição dos grãos e ao fim da deposição (Figura 3).

A primeira etapa foi construída a partir do arquivo de saída gerado no primeiro código, responsável pelas condições iniciais, onde foram inseridos discos com distribuição bidispersa e as suas posições foram delimitadas em função da dimensão da caixa. A haste que representa a fibra, neste momento, foi tratada também como um disco e, em função de suas coordenadas de centro, foi redesenhada. A segunda etapa corresponde a um instante intermediário da simulação, em que ocorre a deposição dos discos sobre a haste, com velocidade inicial igual a 0. A terceira imagem ilustra o sistema em equilíbrio, após a deposição dos grãos sob a fibra.

A partir deste modelo poderão ser aplicados os parâmetros experimentais encontrados por Algarra (2016) e inseridos novas variáveis a fim de simular a penetração de uma raiz no solo.

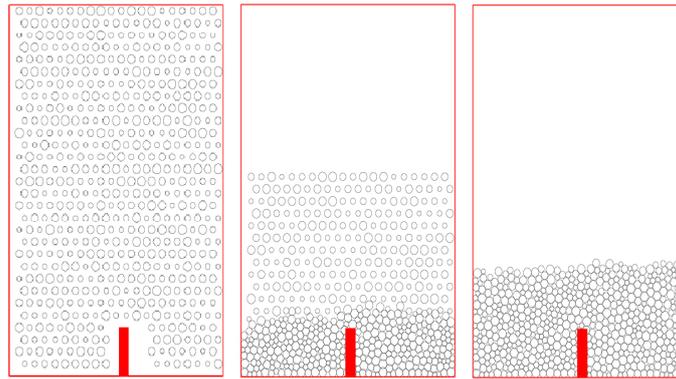


Figura 3- Interação da fibra com o sistema granular: antes, durante e depois do movimento dos grãos em direção a fibra

4. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Um modelo computacional inicial para a interação fluido-estrutura foi construído e, a partir dele será possível variar os valores de *packing fraction* do sistema a fim de caracterizar esse movimento da penetração de uma fibra no sistema granular.

Como perspectiva, acredita-se que, através deste estudo, analisando as forças atuantes sobre a haste e as forças reativas sobre os discos do meio granular, será possível representar a dinâmica da penetração de uma raiz no solo por meio da Dinâmica Molecular.

Agradecimentos

Agradecimentos ao CEFET-MG e à CAPES pelo apoio institucional e financeiro.

REFERÊNCIAS

- Algarra, N. P. **Pénétration d'une fibre flexible dans un milieu granulaire dense**. Tese (Doutorado) — Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2016.
- Allen, M. P.; Tildesley, D. J. **Computer simulation of liquids**. [S.l.]: Oxford university press, 2017.
- Batista, M. d. A.; Paiva, D. de; Marcolino, A. Solos para todos: perguntas e respostas. **Embrapa Solos- Documentos (INFOTECA-E)**, Rio de Janeiro: Embrapa Solos, 2014., 2014.
- Camargo, O. d.; Alleoni, L. Efeitos da compactação no crescimento de plantas. 2006.
- Clark, A. H. et al. Nonlinear force propagation during granular impact. **Physical review letters**, APS, v. 114, n. 14, p. 144502, 2015.
- Cordeiro, M. A. S.; Corá, J. E.; Nahas, E. Atributos bioquímicos e químicos do solo rizosférico e não rizosférico de culturas em rotação no sistema de semeadura direta. **Revista brasileira de Ciência do Solo**, Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, p. 1794–1803, 2012.
- Gennes, P.-G. de. Granular matter: a tentative view. **Reviews of modern physics**, APS, v. 71, n. 2, p. S374, 1999.
- Gubiani, P. I. et al. Tempo para a ocorrência da resistência a penetração restritiva ao feijoeiro em solo com diferentes estados de compactação. Universidade Federal de Santa Maria, 2008.
- Magalhães, C. F. M. Engarrafamento e segregação em empilhamentos abertos de grãos. 2013.
- Moraes, M. T. de et al. Correção da resistência à penetração em função do conteúdo de água em um latossolo vermelho. In: **Congresso Brasileiro de Ciência do solo**, 33., 2011, Uberlândia. Solos nos biomas brasileiros: sustentabilidade e mudanças climáticas. SBCS. UFU. ICIAG. 2011. Embrapa Soja - Artigo em anais de congresso (ALICE). [S.l.].
- Rino, J. P. **Materiais Granulares**. [S.l.]: Sociedade Brasileira de Física, 2001. v. 2
- Sigaud, L. M. **Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares Densos**. Tese (Doutorado) — PUC-Rio, 2009.

COMPUTATIONAL MODELING OF THE PENETRATION OF A FIBER IN A CONFINED DENSE GRANULAR MEDIUM

Abstract. *This work is an initial phase of a simulation of the penetration of a root in the soil through the study of the penetration of a fiber into a confined dense granular medium using the technique of molecular dynamics. Soil as a granular material and root as a biological structure can be considered as a fluid-structure system and to know how this interaction happens can aid in soil and crop management, contributing to both production and stability and soil quality. This initial step concerns the computational modelling of the penetration of a fiber into a granular system. The simulation, therefore, is part of the generation of initial system configurations, in this case, a box full of disks of different diameters, evenly distributed. The box also contains an intruder represented by a rod, attached at one end. The model will be important to add to the next stages of the project in order to study the behavior of a root penetrating the soil and the forces that develop in the system.*

Keywords *Molecular dynamics, Fluid-Structure, Discrete elements, Granular material.*