



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE UMA FIBRA EM UM MEIO GRANULAR DENSO

FABÍOLA FERNANDES DE OLIVEIRA

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria
CEFET-MG

BELO HORIZONTE
AGOSTO DE 2019

FABÍOLA FERNANDES DE OLIVEIRA

**ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE UMA FIBRA EM
UM MEIO GRANULAR DENSO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria
CEFET-MG

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
AGOSTO DE 2019

Oliveira, Fabíola Fernandes de
O48e Estudo do comportamento de uma fibra em um meio granular denso /
Fabíola Fernandes de Oliveira. – 2019.
49 f.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de
Minas Gerais.

1. Materiais granulados – Modelagem matemática – Teses. 2. Solos –
Manejo – Teses. 3. Interação solo-estrutura – Teses. 4. Medidores de
fluxo – Teses. 5. Raízes (Botânica) – Teses. I. Faria, Allbens Atman
Picardi. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.
III. Título.

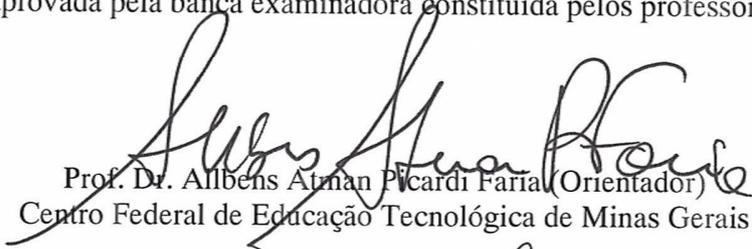
CDD 631.4

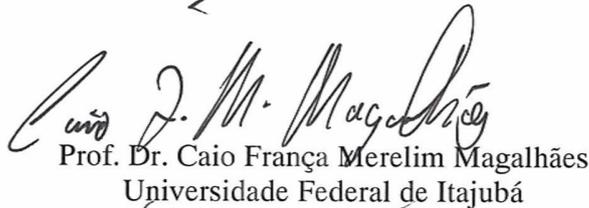


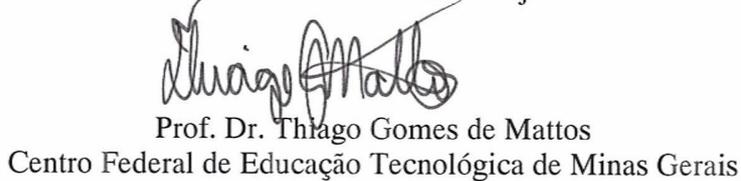
SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

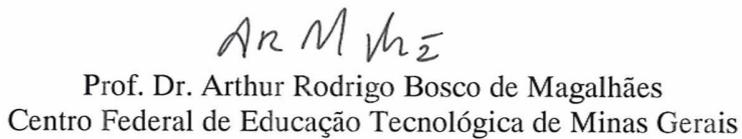
“ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE UMA FIBRA EM UM MEIO GRANULAR DENSO”

Dissertação de Mestrado apresentada por **Fabiola Fernandes de Oliveira**, em 27 de agosto de 2019, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

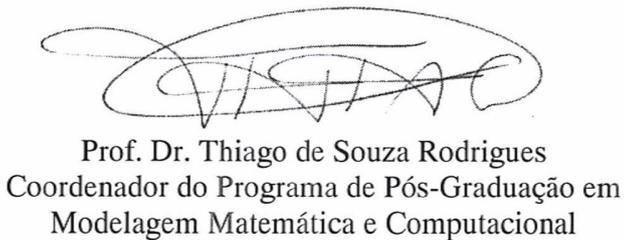

Prof. Dr. Albens Atman Picardi Faria (Orientador)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Caio França Merelim Magalhães
Universidade Federal de Itajubá


Prof. Dr. Thiago Gomes de Mattos
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Arthur Rodrigo Bosco de Magalhães
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida a impressão,


Prof. Dr. Thiago de Souza Rodrigues
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

Agradecimentos

Agradeço a Deus, acima de tudo, pelo dom da vida, pelas oportunidades concebidas e por me guiar nas escolhas realizadas.

Aos meus pais, Edison e Odete, por todo amor, incentivo, apoio, paciência em todos os momentos e pela educação que me deram.

Ao meu noivo, Thiago, por estar sempre ao meu lado, pelo constante incentivo, dedicação e parceria.

Aos meus irmãos, Marcos, Flávia e Fernanda, pela parceria, paciência e apoio de sempre e, aos meus sobrinhos, Maria Fernanda e Theo, pelo imenso amor que me fazem sentir.

Ao meu orientador, Prof Dr. Allbens Picardi Faria, pela oportunidade, confiança, orientação, parceria e prontidão, desde a Iniciação Científica, em 2011.

Aos colegas do MMC e da salinha, pelos momentos difíceis, alegres e de estudo com muita parceria.

Também àqueles amigos de longa data, pela amizade e refúgio nos momentos de estresse.

Às moças da limpeza, pelas poucas conversas, mas suficientes para alegrar os dias.

Ao CEFET-MG e à CAPES pelo auxílio financeiro e estrutural e a todos os professores que contribuíram para minha formação.

Ofereço minha imensa gratidão.

"L'essentiel est invisible pour les yeux." (Antoine de Saint-Exupéry, *Le Petit Prince*)

Resumo

O solo, como material granular, e a raiz, como uma estrutura biológica, podem ser considerados como um sistema fluido-estrutura e o entendimento da dinâmica dessa interação pode auxiliar no manejo do solo e de culturas, contribuindo tanto para a produção quanto para a estabilidade e qualidade do solo. Neste trabalho faz-se o estudo numérico de um sistema fluido-estrutura, extraíndo informações macroscópicas de propriedades microscópicas do comportamento de uma fibra imersa em um meio granular denso. A simulação foi realizada fazendo uso da técnica de dinâmica molecular em duas dimensões. Para tanto, são geradas as configurações iniciais tratando-se de uma caixa com discos de diferentes diâmetros e uniformemente distribuídos. Na simulação, a fibra é representada por um intruso preso em uma das extremidades. Foram estudadas 6 diferentes configurações iniciais, variando a posição da fibra no meio. Dessa forma, as forças atuantes sobre o intruso e as forças reativas no meio granular foram estudadas e, a partir delas, foi possível calcular as tensões atuantes no sistema em equilíbrio e conhecer o comportamento do mesmo com as diferentes inclinações do intruso. O trabalho representa uma etapa inicial para compreender e construir um modelo computacional realístico para simular a penetração de raízes no solo.

Palavras-chave: Meio granular. Dinâmica molecular. Fluido-Estrutura. Elementos discretos. Penetração de raízes.

Abstract

Soil as a granular material and root as a biological structure can be considered as a fluid-structure system and understanding the dynamics of this interaction can help in soil and crop management, contributing to both production and yield, soil stability and quality. In this work a numerical study of a fluid-structure system is made, extracting macroscopic information from microscopic properties of the behavior of a fiber immersed in a dense granular medium. The simulation was performed using the technique of molecular dynamics in two dimensions. To do so, the initial configurations are generated in the case of a box full of disks of different diameters and uniformly distributed. In simulation, the fiber is represented by an intruder trapped at one end. Six different initial configurations were studied, varying the fiber position in the medium. Thus, the forces acting on the intruder and the reactive forces in the granular environment were studied and, from them, it was possible to calculate the tensions acting on the system in equilibrium and to know its behavior with the different inclinations of the intruder. The work represents an initial step to understand and build a realistic computational model to simulate root penetration in the soil.

Keywords: Granular medium. Molecular dynamics. Fluid Structure. Discreet elements. Root penetration.

Lista de Figuras

Figura 1 – Diagrama de fases	5
Figura 2 – Fluxograma do algoritmo <i>Velocity-Verlet</i>	8
Figura 3 – Efeito da resistência do solo à penetração das raízes de um mesmo vegetal.	11
Figura 4 – Penetração da fibra no fluxo granular.	13
Figura 5 – Imagem ampliada do intruso em meio granular	13
Figura 6 – Configuração inicial do sistema	16
Figura 7 – Representação da construção da lista de vizinhos. O tracejado delimita o raio de vizinhança do disco 1.	17
Figura 8 – Problemas com interpenetração	19
Figura 9 – Representação da região de deformação e comprimento de contato entre dois discos em 2D	20
Figura 10 – Gráfico de Coulomb — força de atrito estático em função da velocidade relativa	21
Figura 11 – Gráfico de Coulomb regularizado	21
Figura 12 – Solução da equação que descreve a deformação no contato entre dois grãos	23
Figura 13 – Representação da escolha de um Δt inadequado	24
Figura 14 – Tensor de tensão - 2D	25
Figura 15 – Representação do fluxo granular em direção à haste	29
Figura 16 – Representação das diferentes inclinações da fibra.	30
Figura 17 – Representação do estado final para o caso em que a fibra está a 90° em relação ao fundo da caixa	30
Figura 18 – Um exemplo do estado de equilíbrio para todos os casos de inclinação da fibra.	31
Figura 19 – <i>packing fraction</i> do sistema	31
Figura 20 – Ilustração das componentes das forças resultantes nos grãos do intruso ao longo da simulação.	32
Figura 21 – Tensão normal nos três trechos da fibra.	33
Figura 22 – Tensão normal nos três trechos da fibra. Lado esquerdo e direito, respectivamente.	33
Figura 23 – Tensão normal dos lados esquerdo e direito para inclinação de 15°	34
Figura 24 – Tensão normal nos três trechos da fibra inclinada a 45°	34
Figura 25 – Média da tensão normal dos dois lados da fibra inclinada a 45°	35
Figura 26 – Relação Tensão Normal e Inclinação - Lado esquerdo da fibra.	35
Figura 27 – Relação Tensão Normal e Inclinação - Lado direito da fibra.	36
Figura 28 – Força em x nos lados esquerdo e direito do intruso.	37

Figura 29 – Força em y nos lados esquerdo e direito do intruso.	37
Figura 30 – Distribuição das forças e perfil de tensão normal, nos lados esquerdo e direito da fibra.	38
Figura 31 – Força normal nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 45°.	38
Figura 32 – Força tangencial nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 45°.	39
Figura 33 – Força normal nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 60°.	39
Figura 34 – Força tangencial nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 60°.	39
Figura 35 – σ_{zz} - Tensão Normal medida no fundo da caixa, em cada inclinação da fibra	40
Figura 36 – Perfis de σ_{zz} e σ_{xz} da fibra inclinada a 60°.	41
Figura 37 – Relação das tensões σ_{zz} e σ_{xz} com a altura	42
Figura 38 – Tensão tangencial x Inclinação da fibra.	43
Figura 39 – Tensão normal x Inclinação da fibra.	43
Figura 40 – Área sob a fibra inclinada a 45°.	44

Lista de Algoritmos

Algoritmo 1 – Geração da configuração inicial - <i>Prepbox</i>	15
Algoritmo 2 – Aplicação do fluxo de grãos - <i>Pushbox</i>	18
Algoritmo 3 – Cálculo e construção do perfil de tensões - <i>Tension</i>	27

Sumário

1 – Introdução	1
2 – Fundamentação Teórica	4
2.1 Simulação de Materiais Granulares	4
2.1.1 Dinâmica Molecular	6
2.1.2 <i>Velocity-Verlet</i>	7
2.2 Tensões	8
2.3 Comportamento de Raízes no solo	10
2.4 Modelo Fluido-Estrutura	11
2.4.1 Modelo Experimental	12
3 – Metodologia	14
3.1 Construção do Modelo	14
3.1.1 Configuração inicial do sistema	14
3.1.2 Aplicação da Dinâmica Molecular	15
3.1.2.1 Características das colisões	18
3.1.2.2 Passo de Tempo Δt	23
3.2 Coleta e tratamento de dados	24
3.3 Estudo de tensões	25
4 – Resultados	28
4.1 Preparação do sistema	28
4.2 Fluxo de grãos	29
4.3 Reologia do sistema - Forças e Tensões	32
5 – Conclusão	45
Referências	47

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho se baseia no trabalho realizado por [Algarra \(2016\)](#) em sua tese de doutorado, que trata do estudo da penetração de uma fibra flexível em um fluxo granular denso, de forma experimental. Diante disso, faz-se um estudo desse sistema a fim de desenvolver um modelo para interação de raízes no solo.

As propriedades físicas e biológicas das raízes, bem como as propriedades físicas e químicas do solo, são extensivamente estudadas em suas respectivas áreas de pesquisa, porém pouco se sabe sobre a interação do sistema fluido-estrutura que eles formam ([ALGARRA et al., 2017](#)).

Muitos são os fatores e condições ambientais que determinam o sistema ideal para o crescimento de um vegetal e a qualidade do solo. Porém, a relação entre sistema radicular das plantas e o solo é extremamente importante para ambas partes, tanto para o desenvolvimento e produtividade das culturas quanto para a sustentação e estabilidade do solo ([GUBIANI et al., 2008](#); [CEJAS et al., 2014](#)).

O conhecimento das propriedades do solo associado às informações sobre o comportamento das raízes, é essencial tanto para a produção rural quanto para a proteção e segurança do ambiente. Pois, em função das condições do solo, raízes de plantas de cobertura podem promover a descompactação do solo, enquanto que raízes mais robustas e ramificadas são capazes de alcançar as camadas mais inferiores do solo, em busca de nutrientes e facilitando a disponibilidade hídrica ([CORDEIRO; CORÁ; NAHAS, 2012](#); [BATISTA; PAIVA; MARCOLINO, 2014](#)).

O conhecimento do grau de compactação do solo é, portanto, complementar para o estudo de penetração das raízes a fim de melhor realizar o plantio e permitir o desenvolvimento dos vegetais. A densidade das partículas do solo, a porosidade e resistência à penetração são indicadores que interferem no crescimento dos vegetais e que definem o estado de compactação do solo, o que interfere na sua qualidade ([GUBIANI et al., 2008](#)).

A simulação da dinâmica das raízes em diferentes densidades do solo é importante, pois pode permitir a construção da relação entre esse indicador físico e a resposta do vegetal, considerando as forças atuantes.

O solo, em si, é resultado de processos de intemperismo das rochas, composto, em sua maior parte, por grãos de diferentes tamanhos e formatos e matéria orgânica. Sendo assim, o solo compõe um estado da matéria condensada amplamente estudado e de propriedades peculiares: os materiais granulares.

O estudo de materiais granulares não é recente (RINO, 2001) e, atualmente, tem desempenhado um importante papel tanto na indústria, quanto para o entendimento dos fenômenos da natureza. Prever e entender o comportamento dos materiais granulares, em diferentes condições de trabalho, tem se tornado essencial para uma produção mais eficaz (NEDDERMAN, 2005; SIGAUD, 2009).

Os materiais granulares são simples, porém apesar dessa aparente simplicidade eles podem se comportar de maneira diversa de qualquer outra forma conhecida da matéria — sólida, líquida ou gasosa — e assim, pode ser considerado um estado da matéria por si só (JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996).

Um dos parâmetros mais importantes na caracterização do comportamento de um sistema granular é o *Packing Fraction*, a fração de empacotamento do sistema, que define o comportamento físico do sistema observado. O *packing fraction* corresponde à fração de volume do sistema, o volume ocupado pelo volume total. A matéria granular solta pode se comportar como um fluido, enquanto que sistemas densos podem adquirir características e se comportarem como um sólido (SIGAUD, 2009).

Tanto os materiais granulares compactados ou fluidizados têm uma resposta característica, em função dos esforços externos a que estão submetidos. Um exemplo é o caso de densidades intermediárias, em que o material granular pode mudar de um comportamento fluido para um sólido, ou o contrário, como no caso particular das avalanches, movimento característico de um comportamento semifluido (SIGAUD, 2009). Essas transições ocorrem em função da fração de volume do sistema, ou seja, em função do *Packing Fraction*.

Um fluxo granular denso, portanto, é capaz de compor sistemas do tipo fluido-estrutura: em que uma estrutura intrusa, diversa dos grãos, interage com um fluxo granular. Uma aplicação interessante para esse tipo de estudo diz respeito à mecânica dos solos, como o uso de raízes para fortalecer o solo a fim de prevenir os deslizamentos de terra ou quanto ao crescimento radicular para produção vegetal, em que a planta se desenvolve verticalmente enquanto suas raízes buscam espaço no meio granular (ALGARRA, 2016).

A proposta de estudo teve início a partir do conhecimento da tese de Algarra (2016) e

do interesse da realização de parceria para a construção de um modelo computacional, referente ao sistema por ele apresentado. Dedicou-se, à metodologia deste trabalho, que faz uso da técnica de dinâmica molecular para a compreensão da atuação de uma estrutura em um meio granular.

Assim, este trabalho apresenta a proposta da construção de um modelo para a penetração de uma raiz no solo por meio da dinâmica molecular, a partir do estudo de um sistema fluido-estrutura, representado por um fluxo granular denso e uma fibra flexível. Diante disso, faz-se referência aos dados experimentais obtidos através dos testes realizados pelo grupo de Evelyne Kolb no PMMH (Université Paris-Sorbonne).

O objetivo deste trabalho, portanto, é estudar as condições microscópicas do sistema fluido-estrutura, extraindo informações macroscópicas a fim de propor um modelo compatível com o comportamento da raiz de uma planta penetrando o solo. E, de maneira específica, estudar as forças atuantes no sistema e a resposta à variação das condições do meio.

A dissertação se inicia com a explanação e fundamentação teórica dos conceitos, no que diz respeito a Tensões, Simulação de Materiais Granulares, o comportamento de raízes no solo e o modelo proposto por [Algarra \(2016\)](#). Na metodologia, são detalhadas as etapas para a realização do estudo, como a construção do modelo, coleta e tratamento dos dados e estudo das tensões no sistema. No capítulo 4, são apresentados os resultados de todas as etapas do trabalho e, por fim, no capítulo 5 são pontuadas as considerações finais e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

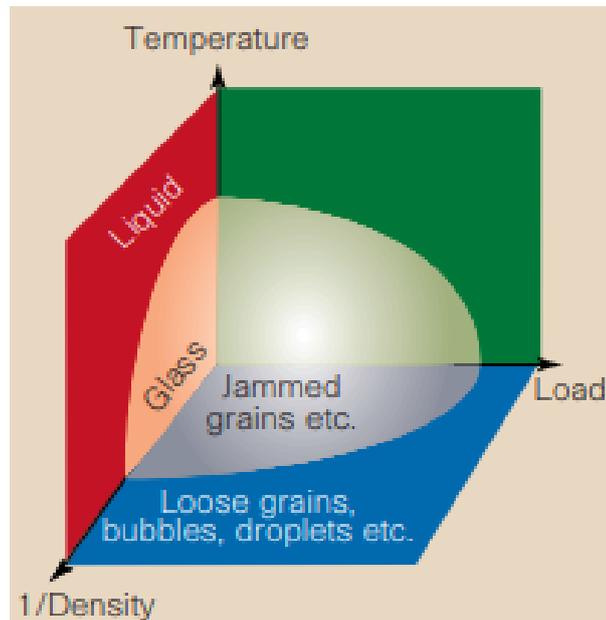
2.1 Simulação de Materiais Granulares

Uma importante introdução sobre sistemas granulares foi dada por Reynolds, em 1885, com a noção de "dilatância", trazendo a ideia de que os materiais granulares se expandem, quando sob pressão, para que qualquer cisalhamento possa ocorrer — justificativa para as avalanches de areia. Antes dele, Coulomb, em 1773, apresentou as ideias de fricção estática e Faraday, em 1831, descobriu a instabilidade convectiva em pós armazenados em recipientes vibrantes (RINO, 2001).

Materiais granulares são, basicamente, um amontoado de objetos macroscópicas, sob as quais o movimento Browniano não é significativo, e os tamanhos dos grãos podem variar desde microns até vários metros. Têm por características serem conglomerados não coesivos sob efeito de exclusão estérica, além disso, a força da gravidade é forte influência em um sistema granular. Duas informações importantes que particularizam os materiais granulares são que as flutuações térmicas não têm influência sobre o sistema e a interação entre as partículas é de característica dissipativa, em função do atrito estático e das sucessivas colisões inelásticas (GENNES, 1999; MAGALHAES, 2013; RINO, 2001).

A matéria granular pode exibir comportamento sólido ou líquido em função, principalmente, de densidade volumétrica do sistema e, por não ser um parâmetro relevante no estudo de materiais granulares, a temperatura não é levada em consideração. O *packing fraction* então, está fortemente ligado à tensão de cisalhamento e, juntos, esses parâmetros guiam o estudo de transição de engarrafamento para materiais granulares, como ilustrado na [Figura 1](#), que corresponde a um diagrama de fases geral usado para auxiliar no estudo desse fenômeno (MAGALHAES, 2013; O'HERN et al., 2003).

Figura 1 – Diagrama de fases



Fonte: (O'HERN et al., 2003)

Um sistema granular denso é caracterizado por uma densidade crítica de 0,81, considerando um sistema em duas dimensões. Em três dimensões, a densidade de um sistema granular de uma mistura aleatória gira em torno de 0,64 — chamado de acondicionamento aleatório (O'HERN et al., 2003). Esses valores, portanto, caracterizam a transição do comportamento do sistema.

Os materiais granulares estão extremamente presentes no cotidiano, como exemplo: nos processos da mineração, nos silos para armazenamento de grãos, nas indústrias alimentícias. E, em virtude do controle e manuseio desses materiais não serem fortemente desenvolvidos, muitas perdas e transtornos ainda ocorrem no transporte e armazenamento de materiais granulares (RINO, 2001).

A simulação computacional permite a ligação entre as propriedades microscópicas de um sistema e as macroscópicas de interesse experimental. A fim de obter propriedades macroscópicas faz-se uso da mecânica estatística, que estuda o comportamento de sistema com elevado número de entidades constituintes. Assim, calcula-se propriedades macroscópicas como pressão, energia interna, volume, temperatura, etc (ALLEN; TILDESLEY, 2017).

Um método de simulação computacional que permite estudar o movimento de partículas, conhecendo as equações que regem seus movimentos e seu potencial de interação, é o método de Dinâmica Molecular (ALLEN; TILDESLEY, 2017). Além disso, é fortemente utilizado para simulação de materiais granulares por ser adequado a sistemas dinâmicos e estáticos (MAGALHAES, 2013; RAPAPORT et al., 1996), permitindo calcular as forças em

um sistema fluido-estrutura, porém é um modelo difícil de ser construído.

2.1.1 Dinâmica Molecular

A dinâmica molecular é um técnica determinística usada para os movimentos físicos de partículas dependentes do tempo. É o termo utilizado para descrever um conjunto de soluções para as equações clássicas de movimento das partículas (ALLEN; TILDESLEY, 2017).

Partindo da mecânica, os grãos são tratados como uma coleção de discos sujeitos a forças newtonianas. Portanto as equações de movimento das partículas são obtidas integrando a segunda Lei de Newton, juntamente a um modelo iterativo para estudar a evolução do sistema de infinitos corpos (SIGAUD, 2009; MAGALHAES, 2013).

É possível dizer que esta técnica adquiriu importância a se dizer que se tornou uma ferramenta indispensável para simular muitos aspectos da dinâmica dos materiais granulares, desde que tomadas as devidas precauções sobre tempo e escalas espaciais (DURAN, 2012).

Para simulações realizadas em duas dimensões, assume-se que os grãos têm formato de discos homogêneos e de espessura desprezível. 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; MAGALHAES, 2013).

O princípio do método, portanto, é resolver em etapas incrementais regulares, as equações que governam as mudanças no momento linear e angular da colisão partículas (DURAN, 2012).

Para um sistema de N grãos, sob ação da gravidade, tem-se as seguintes equações:

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

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

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

Cada par de partículas em contato é representado pelos índices i e j . A posição das partículas é determinada pelas coordenadas do seu centro de massa, x_i e y_i , e a velocidade angular do grão está representada pela variável w_i . As variáveis do modelo m_i , I_i e g são, respectivamente, a massa, o momento de inércia de cada grão e a aceleração da gravidade, 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 considerada constante no passo de tempo corrente.

As equações de movimento são discretizadas e a evolução das variáveis no tempo é realizada de maneira iterativa. Os valores das coordenadas do centro de massa do grão e da sua velocidade angular (x_i , y_i e w_i) são atualizados a cada passo de tempo (Δt), ou seja, os valores correspondentes ao tempo t são calculados a partir dessas variáveis no instante $t - \Delta t$. Dessa forma, a partir da condição inicial do sistema é conhecida as condições nos tempos seguintes e, conseqüentemente, trajetória do sistema (MAGALHAES, 2013).

Existem diferentes algoritmos criados para a determinação da trajetória de um sistema como esse. São algoritmos resolvidos por equações de recorrência, como método de Euler, "Verlet", "Leap-frog", "Velocity-Verlet" etc (ALLEN; TILDESLEY, 2017; MAGALHAES, 2013). Para este modelo será utilizado o método de "Velocity-Verlet", detalhado no tópico seguinte.

A escolha do passo de tempo é importante por se tratar de simulação numérica de variáveis contínuas. Portanto a solução é aproximada e, a cada passo de tempo, há um erro que se acumula ao longo da simulação. Logo, sendo o passo de tempo Δt proporcional ao erro gerado, deve-se estar atento à sua escolha (MAGALHAES, 2013).

2.1.2 Velocity-Verlet

Velocity-Verlet é um algoritmo que determina a velocidade $v(t)$ ao mesmo tempo que a posição $r(t)$. É um método de integração numérica para equações de segunda ordem (ALLEN; TILDESLEY, 2017).

Quando aplicado às equações de movimento 1, 2 e 3, o algoritmo resulta nas seguintes equações de recorrência:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t) \Delta t + \frac{\vec{F}_i(t)}{2m_i} (\Delta t)^2 \quad (4)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \left[\frac{\vec{F}_i(t) + \vec{F}_i(t + \Delta t)}{2m_i} \right] \Delta t \quad (5)$$

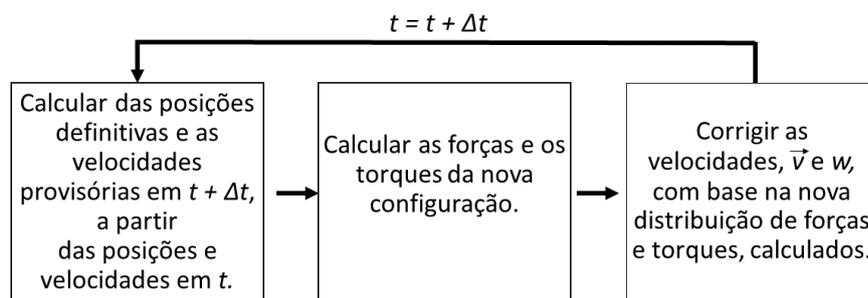
$$w_i(t + \Delta t) = w_i(t) + \left[\frac{\tau_i(t) + \tau_i(t + \Delta t)}{2I_i} \right] \Delta t \quad (6)$$

O algoritmo realiza, primeiramente, o cálculo das posições (Equação 4) usando a expansão em série de Taylor (até segunda ordem) em torno de t . Só então são calculadas as novas forças e torques que atuam no grão i no instante t (\vec{F}_i e τ_i).

As equações 5 e 6 são obtidas por um passo intermediário, em que as velocidades são calculadas em $t + \Delta \frac{t}{2}$, com a força e torque obtidos da configuração no instante t . A nova configuração de forças e torques é, então, aplicada ao cálculo e correção das velocidades no instante $t + \Delta t$, a partir das velocidades do tempo intermediário ($t + \Delta \frac{t}{2}$) (MAGALHAES, 2013).

Na Figura 2 é apresentado o fluxograma do algoritmo *Velocity-Verlet*.

Figura 2 – Fluxograma do algoritmo *Velocity-Verlet*.



Fonte: (MAGALHAES, 2013) (Adaptado).

Além de juntar a conservação dos movimentos linear e angular, o algoritmo é capaz de produzir soluções invariantes por inversão temporal, que são da natureza das equações de movimento (ALLEN; TILDESLEY, 2017).

2.2 Tensões

Estudar as tensões em um sistema granular permite relacionar o conhecimento das forças de contato e da geometria na escala dos grãos até uma descrição contínua de um campo de tensão. Esse *link* é muito importante quando são feitas simulações numéricas discre-

tas em que os detalhes microscópicos do sistema são conhecidos e pretende-se extrair propriedades macroscópicas do sistema (MEHTA, 2007).

Para alguns autores, a segunda lei de Newton é usada para encontrar a definição do tensor de tensões, levando em consideração as equações de equilíbrio com a função de média (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013). Função essa também chamada de função de *coarse graining* (ϕ) e que promove uma suavização da curva, referente aos parâmetros microscópicos, a fim de permitir a descrição do comportamento físico macroscópico. A seguir é feito um detalhamento a fim de obter o tensor de tensões, derivando da função de Goldhirsch, utilizando a função de *coarse graining*.

No caso estático, sendo m a massa da partícula i e $v_{i\alpha}$ sua velocidade na componente α ,

$$m_i \frac{dv_{i\alpha}}{dt} = \sum_{j \neq i} f_{ij\alpha} \quad (7)$$

onde $f_{ij\alpha}$ é o componente α da força exercida pela partícula j na partícula i . E, usando a terceira lei de Newton, $f_{ij\alpha} = -f_{ji\alpha}$, é possível escrever:

$$\sum_{i,j,i \neq j} f_{ij\alpha} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_{i,j,i \neq j} f_{ji\alpha} \phi(\vec{r} - \vec{r}_j) = - \sum_{i,j,i \neq j} f_{ij\alpha} \phi(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (8)$$

Sendo assim,

$$\phi(\vec{r} - \vec{r}_i) - \phi(\vec{r} - \vec{r}_j) = \int_0^1 ds \frac{\delta}{\delta s} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}) \quad (9)$$

Para o caso que $\vec{r}_{ij} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$

$$\frac{\delta}{\delta s} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}) = r_{ij\beta} \frac{\delta}{\delta r_\beta} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}) \quad (10)$$

Dessa forma tem-se a expressão final que representa a componente do tensor de tensão $\sigma_{\alpha\beta}$ (Equação 11), que mede a tensão provocada pela componente α da força, na direção β .

$$\sigma_{\alpha\beta} \vec{r} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \int_0^1 ds \phi(\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}) \quad (11)$$

A [Equação 11](#) resulta na unidade de força por área, correspondendo à unidade de pressão e, sendo a análise realizada em duas dimensões, é possível expressar como unidade de tensão.

A realização do estudo de tensões deste trabalho está descrita no capítulo 3.

2.3 Comportamento de Raízes no solo

As características do solo, como a compactação e a quantidade de água, são essenciais para o desempenho das culturas ([GUBIANI et al., 2008](#)). O alongamento das raízes é vital para o crescimento das plantas e o movimento dessas estruturas no solo está intimamente ligado ao estresse hídrico e à impedância mecânica ([CEJAS et al., 2014](#)).

O estresse hídrico diz respeito à redução de disponibilidade hídrica no solo, que ocorre na natureza, geralmente, de maneira gradual. Esse é um fator limitante que afeta o crescimento e o desenvolvimento do vegetal ([FILHO; STACCIARINI-SERAPHIN, 2001](#)).

A impedância mecânica, por sua vez, como a resistência do solo à passagem das raízes, é comumente proporcionada pela compactação do solo, afeta o crescimento da planta e interfere na morfologia das raízes ([SCAPINELLI et al., 2016](#))

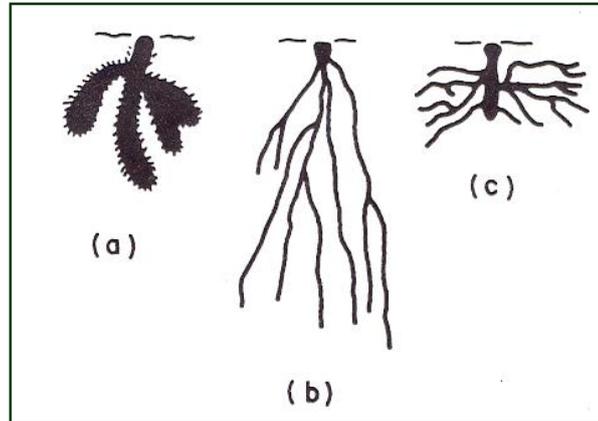
Um experimento realizado por [Wiersum \(1957\)](#) ilustrou a necessidade que as raízes têm de forçar a passagem para o desenvolvimento da planta. Foram cultivadas diferentes plântulas em tubos de diversos diâmetros, com areia compactada, e o autor concluiu que a penetração das raízes diminui quanto menor o diâmetro do tubo, sendo essa uma resposta à alteração do meio. E, esse estudo traduz o significado da impedância mecânica para o quanto a raiz precisa exercer para abrir caminhos de passagem ou aumentar sua dimensão ([CAMARGO; ALLEONI, 2006](#)).

Quando o teor de água é baixo ou quando os grãos de solo são muito rígidos, ou estão compactados, o crescimento das raízes e, conseqüentemente, o desenvolvimento do vegetal podem ser comprometidos ([CEJAS et al., 2014](#)).

A resistência do solo à penetração (RP) é um dos indicadores do grau de compactação do solo e é fortemente influenciada pela umidade ([MORAES et al.,](#)). A compactação do solo resulta na diminuição dos poros, bloqueando a passagem da raiz principal com o crescimento da cultura. A planta então age usando mecanismos de defesa, como o crescimento de raízes laterais com diâmetros adaptados à passagem pelos poros. Essas raízes atuam da mesma forma, quando encontram obstáculos para o crescimento, como é possível observar na [Figura 3](#). Diante disso, se essa mesma impedância ocorre em ambos casos, o sistema não se desenvolve por completo e as raízes ficarão cobertas por pelos

radiculares (CAMARGO; ALLEONI, 2006).

Figura 3 – Efeito da resistência do solo à penetração das raízes de um mesmo vegetal. (a) Com impedimento às raízes principal e laterais. (b) Sem impedimento. (c) Com impedimento à raiz principal.



Fonte: (CAMARGO; ALLEONI, 2006)

A compactação do solo, então, acaba se tornando um fator limitante para o desenvolvimento de culturas e, conseqüentemente, para o aumento da produtividade e sustentabilidade, no plantio direto (SILVA; IMHOFF; KAY, 2004).

O valor de RP que é, normalmente, utilizado como crítico é igual a 2MPa (TAYLOR; ROBERSON; JR, 1966), o suficiente para impedir o desenvolvimento das raízes e da parte aérea das plantas. Porém já existem resultados que apresentaram limitações ao crescimento com RP abaixo desse limite. Esses valores variam basicamente em função da densidade do solo e do teor de umidade (GUBIANI et al., 2008).

2.4 Modelo Fluido-Estrutura

O estudo da passagem de um fluido por um obstáculo rígido visa compreender a resposta à deformação e o escoamento desse fluido, ou seja, sua reologia (ALGARRA, 2016). Muitos estudos são realizados com esses obstáculos em meio a um fluxo granular denso com o intuito de caracterizar as forças atuantes em função da geometria do intruso (MIDI, 2004). No caso em que o obstáculo é flexível, existirá uma resposta tanto do fluido quanto da estrutura, dessa forma tem-se um sistema fluido-estrutura em que o intruso sofrerá deformação e o fluido uma perturbação (ALGARRA, 2016).

Diversos estudos tem sido realizados para analisar a relação fluido-estrutura para diferentes sistemas. Exemplos de trabalhos que estudam o modelo fluido-estrutura, sendo essa estrutura um objeto flexível, são: o estudo para a redução de arraste e reconfiguração de objetos em fluxos de água controlados (SCHOUVEILER; BOUDAUD, 2006; GOSSELIN;

LANGRE; MACHADO-ALMEIDA, 2010), interação entre o meio e a natação de peixes, voo de pássaros e insetos (RAMANANARIVO; GODOY-DIANA; THIRIA, 2011), movimentação de microrganismos flagelados ou ciliados (LAUGA; POWERS, 2009). A interação da copa de árvores com os ventos e a penetração de raízes no solo, também são objetos de estudo da relação fluido-estrutura (ALGARRA, 2016).

O impacto no meio granular pela introdução de um objeto é muito comum tanto em processos naturais quanto artificiais. E, no caso do crescimento de uma planta no solo, durante a penetração da raiz, a propagação da força envolve efeitos não-lineares (CLARK et al., 2015).

Um dos trabalhos que envolvem o crescimento radicular, consiste na observação do desenvolvimento de uma planta em meio a grãos foto-elásticos, contribuindo para o entendimento da complexa relação entre o crescimento radicular e a mecânica do solo (BARÉS et al., 2017). Ainda neste ponto, Fakhri et al. (2017) desenvolveu um modelo de dinâmica molecular e apontou parâmetros de forma, em função da trajetória de uma raiz no solo e a relação de sua rigidez e densidade do solo.

Durante o desenvolvimento do vegetal, as raízes encontram barreiras que demandam a ação de determinada força para manter o crescimento da planta, em função, por exemplo, das características físicas do solo. Portanto, um modelo fluido-estrutura pode ser considerado para esse sistema, que consiste na passagem de um fluxo granular denso por uma fibra presa em uma das extremidades. Analogamente, a força exercida pela passagem dos grão sob a fibra pode representar a força que a raiz exerce para penetrar o solo.

2.4.1 Modelo Experimental

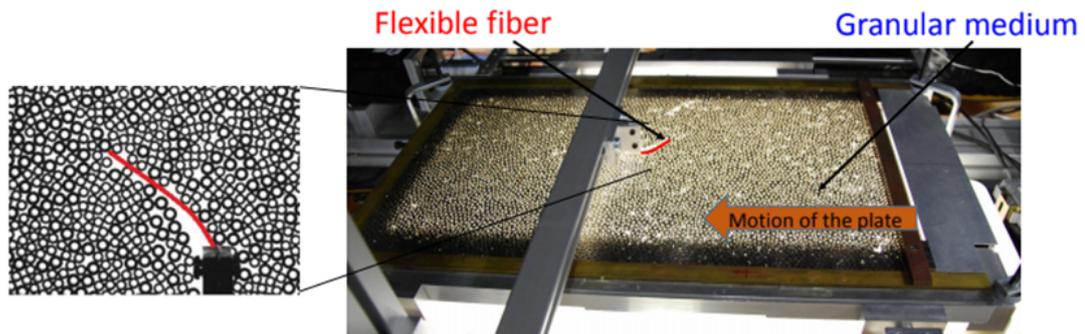
Um modelo experimental de interação fluido-estrutura, entre uma haste flexível e um meio granular denso, foi realizado por (ALGARRA, 2016). Nesse trabalho, um sistema bidimensional foi montado com o fluxo de cilindros interagindo com uma fibra elástica presa por um anteparo e os parâmetros de controle do sistema foram o *packing fraction*, comprimento da haste e grau de rigidez da fibra.

Para este experimento, a fibra foi alinhada ao longo do eixo y , deixando livre a extremidade que tem sentido contrário ao fluxo granular. Com o início do fluxo a fibra passa a penetrar o meio granular (Figura 4) (ALGARRA et al., 2017).

Durante experimento, a inflexão da fibra é medida, bem como as forças que são exercidas sobre ela e a reorganização do meio granular. No estudo foram observados diferentes regimes de evolução do sistema, sendo que para baixas e grandes deflexões da fibra, o sistema evolui estocasticamente como uma consequência do meio granular.

Nesse estudo, foi apontada uma quebra de simetria que altera os regimes associados tanto

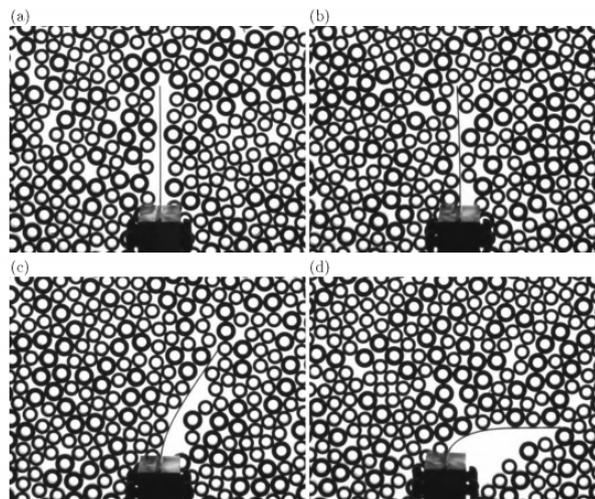
Figura 4 – Penetração da fibra no fluxo granular.



Fonte: (ALGARRA, 2016)

à fibra quanto ao meio granular, em função das pequenas oscilações em torno do ponto de equilíbrio da fibra e de eventos de flexão associados a avalanches granulares (Figura 5) (ALGARRA, 2016).

Figura 5 – Imagem ampliada do intruso em meio granular. (a) Antes de iniciar o experimento. (b) Após o início do fluxo de partículas e pequenas flutuações do sistema após deslocamento do intruso. (c) e (d) Imagens dos eventos de flexão da fibra.



Fonte: (ALGARRA, 2016)

Capítulo 3

Metodologia

Esta pesquisa parte do estudo experimental de [Algarra \(2016\)](#), que permite o embasamento para propor um modelo computacional realístico da interação de materiais granulares com uma estrutura, a fim de simular a penetração de raízes no solo. A técnica adotada para realizar a simulação de um sistema de duas dimensões foi a Dinâmica Molecular.

3.1 Construção do Modelo

Para a construção do modelo foram considerados uma caixa repleta de discos, desprezando a influência do meio intersticial, com as forças atuantes em função da movimentação dos grãos submetidos à força da gravidade.

A fim de simular o efeito de penetração da raiz, faz-se o fluxo das partículas em direção a haste, neste trabalho considerou-se o fluxo como a queda dos grãos em direção ao intruso.

A construção do modelo foi dividida em duas etapas. A primeira corresponde à geração das configurações iniciais do sistema e, a segunda, à aplicação do fluxo de partículas. As duas etapas foram realizadas em códigos distintos, porém complementares.

3.1.1 Configuração inicial do sistema

A configuração inicial é gerada no algoritmo *Prepbox* e tem como dados de entrada: o tamanho da caixa, o raio máximo e mínimo das partículas, lei de distribuição e a dimensão do intruso.

O pseudo código descrito no [algoritmo 1](#) representa o *Prepbox*, a seguir.

Algoritmo 1: Geração da configuração inicial - *Prepbox*

Entrada: Dados do tamanho do sistema: comprimento e largura da caixa; distribuição dos raios das partículas, dimensões do intruso (fibra)

Saída: Configuração Inicial do Sistema

início

 Inicialização e leitura dos parâmetros de entrada;

 Para cada partícula **repita**

 Cálculo do raio das partículas;

 Cálculo das posições das partículas;

até número total de grãos;

fim

Na realização do cálculo dos raios existe a possibilidade de escolha da distribuição dos raios das partículas: distribuição uniforme, gaussiana ou bidispersa. Neste caso optou-se pela distribuição bidispersa, pois é o tipo de distribuição que tem menor chance de cristalização do sistema.

O cálculo das posições das partículas, por sua vez, é limitado em função do comprimento e largura da caixa, respectivamente.

Na inserção dos dados e cálculo das posições, o intruso foi tratado, inicialmente, como apenas uma partícula e foi conformado como um retângulo na conversão dos dados de posição em imagem. Porém, em seguida, o intruso foi construído com a junção de 40 partículas dispostas em duas colunas, com o intuito de estudar a haste, ponto a ponto.

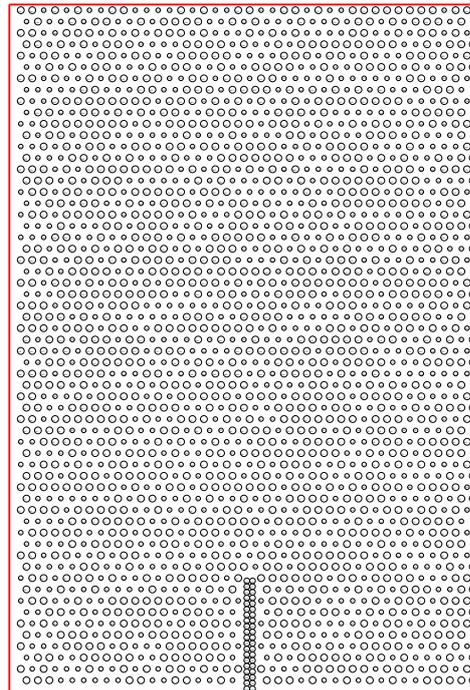
O arquivo de saída que é gerado, neste momento, corresponde, portanto a uma caixa repleta de discos de diferentes diâmetros, e um intruso representado por uma haste, preso em uma das extremidades ([Figura 6](#)).

Neste momento do trabalho, foram realizadas diversas tentativas para a construção das configurações iniciais de um intruso que pudesse ser flexível durante a simulação, porém como não foi possível, foram geradas configurações iniciais com o intruso fixo em diferentes inclinações no sistema.

3.1.2 Aplicação da Dinâmica Molecular

A dinâmica molecular é realizada usando as forças de contato entre as partículas em função das interações, dadas pelas forças de contato, e iterações das equações de movimento de Newton, por meio do algoritmo Velocity-Verlet.

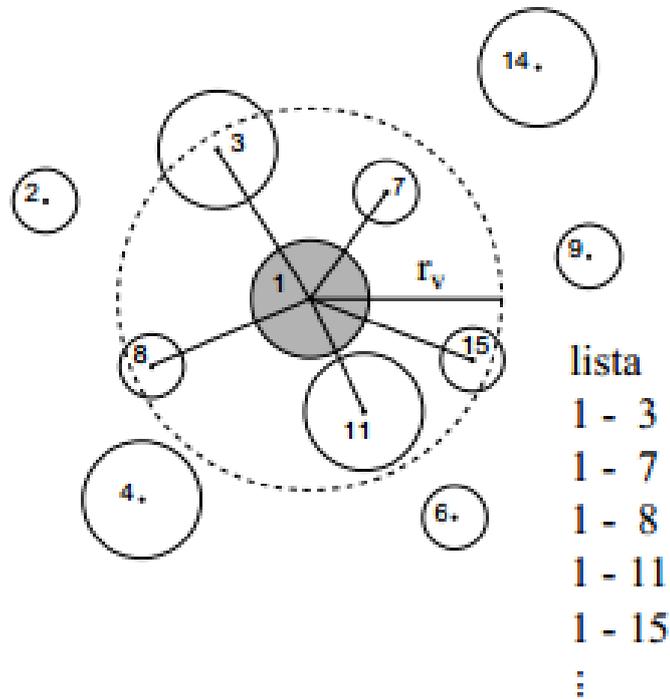
Figura 6 – Configuração inicial do sistema



A dinâmica ocorre no algoritmo *Pushbox*, que parte da leitura das configurações iniciais geradas no *Prepbox*, como parâmetros entrada.

Para cada passo de tempo discretizado, enquanto o equilíbrio do sistema ou o limite de iterações não é alcançado, faz-se a busca dos grãos vizinhos. A busca é realizada em torno de cada disco, delimitada por um raio máximo de vizinhança. A busca por vizinhos incrementa uma lista — proposta por Verlet (1967) — que é refeita a cada 100 iterações (Figura 7). Essa busca, limitada, de vizinhos, juntamente com a atualização da lista, otimiza a simulação e permite um menor custo computacional, de $O(n^2)$ para a ordem $O(n \log n)$.

Figura 7 – Representação da construção da lista de vizinhos. O tracejado delimita o raio de vizinhança do disco 1.



Fonte: (MAGALHAES, 2013)

As novas posições são calculadas com base nos valores de velocidades e acelerações. Em função da lista de vizinhos e das novas posições, são detectados os contatos entre os discos e então é criada uma lista de contatos. No momento do contato entre os grãos é feito o cálculo de interpenetração entre os discos i e j .

São determinadas as forças de contato entre eles com base nas reações dos contatos. Então as posições e velocidades de cada grão são recalculadas e corrigidas ainda para o mesmo instante de tempo. Essas etapas são o desencadeamento da aplicação do algoritmo *verlet* e o [algoritmo 2](#), seguinte, ilustra a dinâmica, contemplando todas as etapas.

Algoritmo 2: Aplicação do fluxo de grãos - *Pushbox*

Entrada: Configuração Inicial do Sistema (arquivo resultante do *Prepbox*)

Saída: Sistema fluido- estrutura em equilíbrio

início

Inicialização e leitura das configurações;

Busca de vizinhos;

Para cada passo de tempo **repita**

se *passadas 100 passos de dinâmica molecular* **então**

 Busca de Vizinhos;

fim

 Previsão das posições;

 Detecção de contatos;

 Cálculo das forças atuantes;

 Arquiva as reações;

 Correção das posições;

se *passadas 200 iterações* **então**

 Verifica o equilíbrio do sistema;

 Arquiva as reações;

fim

se *passadas 1000 iterações* **então**

 Salva as configurações no arquivo;

fim

até *o equilíbrio do sistema ou número de iterações ser alcançado*;

Arquiva as reações finais;

Salva as configurações finais no arquivo;

fim

O arquivo de saída 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 podem, então, ser convertidos a imagens que permitem ilustrar a evolução do sistema.

3.1.2.1 Características das colisões

Nas colisões entre os grãos é considerada a ocorrência de deformação elástica. Além da força elástica \vec{f}_{el} leva-se em consideração também, para descrever a interação entre os grãos, uma força de atrito estático \vec{f}_{ae} e uma força de amortecimento \vec{f}_{am} . A força F_{ij} e torque τ_{ij} que atuam no grão i em interação com o grão j são dados pelas equações 12 e

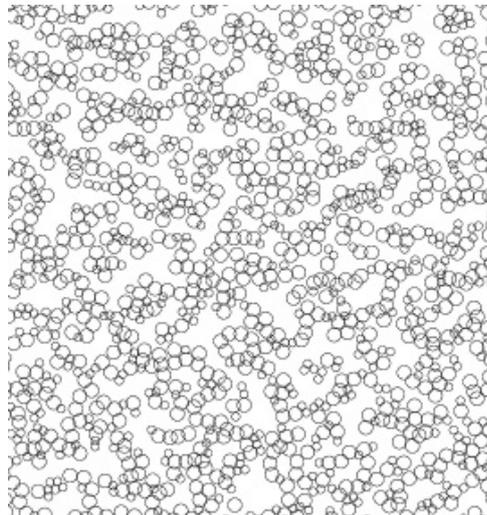
13 (MAGALHAES, 2013).

$$\vec{F}_{ij} = \vec{f}_{el} + \vec{f}_{ae} + \vec{f}_{am} \quad (12)$$

$$\tau_{ij} = \vec{r} * \vec{F}_{ij} \quad (13)$$

Quando não são levadas em consideração todas as forças atuantes nos contatos entre os grãos, ou quando as considerações feitas são inadequadas, as colisões podem resultar em grandes valores para interpenetração dos discos, e conseqüentemente, erros na simulação [Figura 8](#).

Figura 8 – Problemas com interpenetração



Portanto, a fim de obedecer a todas as forças atuantes no sistema levou-se em conta as seguintes forças.

- *Força Elástica*

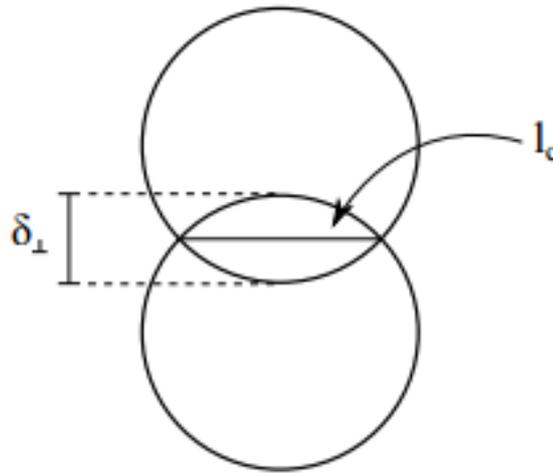
A força elástica que surge das colisões varia com a deformação δ_{\perp} , que é normal à superfície de contato. O expoente que rege essa relação para partículas em três dimensões é $3/2$, proposto por Hertz. Para duas dimensões, faz-se menção aos argumentos apresentados por [Duran \(2012\)](#), afirmando que a força depende da profundidade de penetração ([DURAN, 2012](#)).

O comprimento de contato l_c é a medida da extensão da circunferência dos discos em contato [Figura 9](#). Considerando que a deformação esteja circunscrita a uma circunferência

de raio l_c é possível obter uma relação linear entre F e δ_{\perp} a partir da relação tensão deformação $p = E\delta_{\perp}/l_c$, sendo p a pressão e E o módulo de Young (MAGALHAES, 2013).

$$F \sim pl_c = \frac{E\delta_{\perp}}{l_c}l_c = E\delta_{\perp} \quad (14)$$

Figura 9 – Representação da região de deformação e comprimento de contato entre dois discos em 2D



Fonte: (MAGALHAES, 2013)

Dessa forma a força elástica que atua no grão i em contato com o grão j , na direção normal, é dada pela Lei de Hooke (Equação 15).

$$f_{el} = -k_n\delta_{\perp}\vec{n}_{ij} \quad (15)$$

A constante que caracteriza a resistência do material é expressa pelo parâmetro k_n e o vetor \vec{n}_{ij} é unitário e aponta do centro do grão j para o centro do grão i , pois $\delta_{\perp} < 0$.

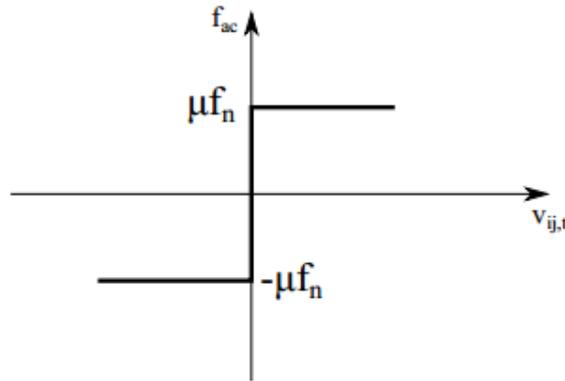
Sendo r_{ij} a distância entre os grãos i e j e d_i e d_j , seus respectivos diâmetros, a deformação δ_{bot} é dada pela relação

$$\delta_{\perp} = \begin{cases} r_{ij} - \frac{d_i+d_j}{2}, & 2r_{ij} \leq d_i + d_j \\ 0, & 2r_{ij} > d_i + d_j \end{cases} \quad (16)$$

- Força de Atrito

A força de atrito, se trata da Lei de Coulomb, ocorre no sentido contrário ao movimento, é indeterminada quando não existe movimento e é constante quando contrário [Figura 10](#). O valor máximo depende somente da força de compressão normal entre as superfícies.

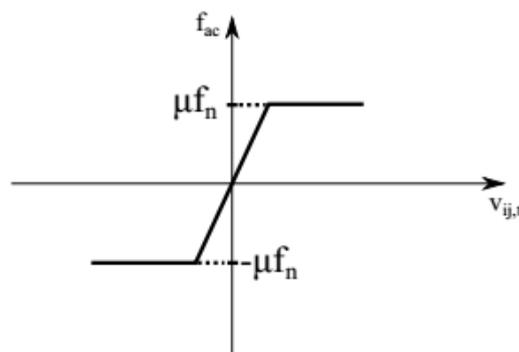
Figura 10 – Gráfico de Coulomb — força de atrito estático em função da velocidade relativa



Fonte: ([MAGALHAES, 2013](#))

Para ser possível o tratamento do atrito na dinâmica molecular, eliminando essa indeterminação, elimina-se a descontinuidade em $v = 0$, no gráfico de Coulomb [Figura 11](#).

Figura 11 – Gráfico de Coulomb regularizado



Fonte: ([MAGALHAES, 2013](#))

No regime estático, a interação pode ser representada por uma mola na direção da superfície de contato. Tomando por base que [Cundall e Strack \(1979\)](#) calcularam o atrito considerando o deslocamento em relação ao ponto de contato ao invés da velocidade relativa. Dessa forma conseguiram reproduzir algumas propriedades mecânicas dos materiais granulares ([MAGALHAES, 2013](#)). Sendo assim, a força de atrito do grão i em interação com o grão j é

descrita por

$$\vec{f}_{ae} = \begin{cases} -k_s \delta_{\parallel} \vec{t}_{ij}, k_s |\delta_{\parallel}| \leq \mu f_{el} \\ \frac{\delta_{\parallel}}{|\delta_{\parallel}|} \mu f_n \vec{t}_{ij}, k_s |\delta_{\parallel}| > \mu f_{el} \end{cases} \quad (17)$$

O vetor \vec{t}_{ij} corresponde a uma rotação de 90° no sentido anti-horário do vetor \vec{n}_{ij} . Assim, é unitário e tangente à superfície do grão no ponto de contato. O parâmetro k_s é a constante de rigidez tangencial do contato, ou seja, na direção do vetor \vec{t}_{ij} , e μ é o coeficiente de atrito.

É preciso manter a informação da deformação tangencial δ_{\parallel} durante todo o tempo de contato dos grãos, pois ela depende da posição em que foi formado o contato. Isso, então, soma contribuições à \vec{f}_{ae} em cada passo de tempo, enquanto existir o contato. Levando em consideração que a \vec{f}_{ae} existe no intervalo $[-\mu f_{el}, \mu f_{el}]$.

$$\vec{f}_{ae}(t + \Delta t) = \vec{f}_{ae}(t) - k_s \left(\vec{v}_{ij} * \vec{t}_{ij} - \frac{d_i w_i + d_j w_j}{2} \right) \Delta t \vec{t}_{ij}, \vec{f}_{ae} < \mu f_{el} \quad (18)$$

A expressão que representa a deformação tangencial entre o instante t e $(t + \Delta t)$, na [Equação 18](#), é $[\vec{v}_{ij} * \vec{t}_{ij} - (d_i w_i + d_j w_j)/2]$.

- *Força de Amortecimento*

Os contatos entre os grãos tem natureza dissipativa e essa é uma característica fundamental dos sistemas granulares. Em uma colisão, a energia é dissipada de diferentes formas: parte é dissipada em deformações permanentes e parte transformada em graus de agitação. Neste trabalho, a dissipação acontece nos termos de amortecimento e atrito estático (Equação 19).

$$f_{am} = -\gamma(\vec{v}_{ij} * \vec{n}_{ij})\vec{n}_{ij} \quad (19)$$

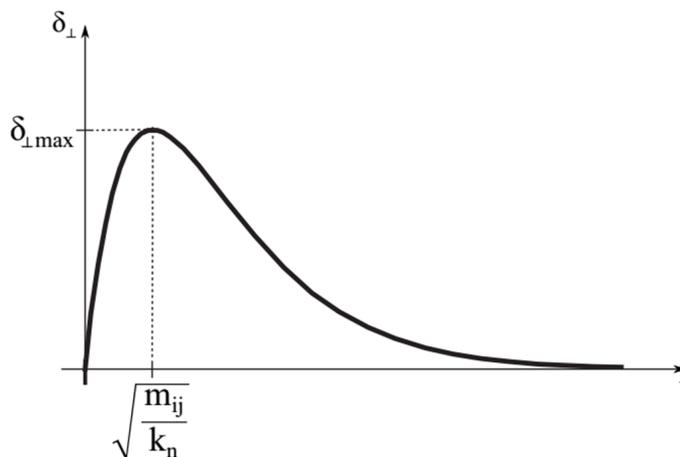
Nas simulações, foi adotado um valor para o coeficiente de amortecimento, levemente abaixo do crítico.

3.1.2.2 Passo de Tempo Δt

Por se tratar de uma escolha, inicialmente, arbitrária e de um parâmetro extremamente importante na dinâmica molecular, algumas simulações foram realizadas para determinar o melhor valor para o passo de tempo Δt .

O critério para a escolha do tempo de discretização é que seu valor deve ser muito menor do que o tempo de ocorrência da deformação máxima entre o contato das duas menores partículas do sistema, já que a duração do contato é da ordem do tempo que os discos levam para atingirem a deformação máxima, que é o tempo característico (Figura 12) ((MAGALHAES, 2013)).

Figura 12 – Solução da equação que descreve a deformação no contato entre dois grãos



Fonte: MAGALHAES (2013)

Portanto, dado que $\delta(0) = 0$ e $v(0) = v_0$, a solução da equação de deformação entre duas partículas é $\delta(t) = v_0 t e^{-t/t_c}$ e o passo de tempo que melhor atendeu este trabalho foi

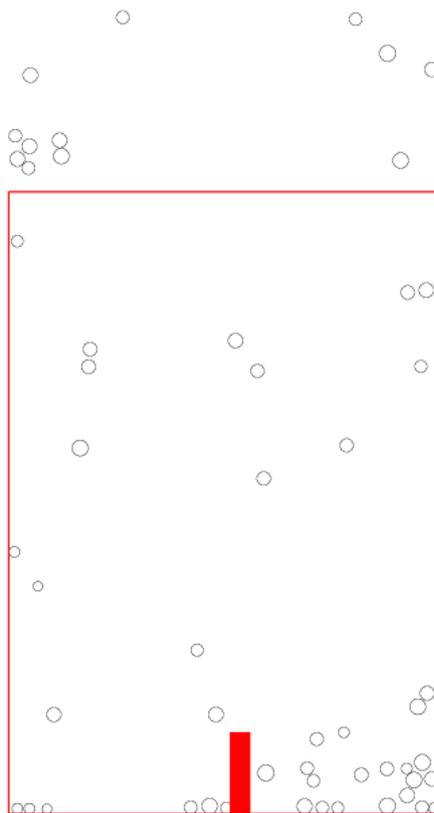
calculado então a partir da equação 20, em que $m_{ij,min}$ é a menor massa do sistema e k_n o coeficiente elástico.

$$\Delta t = \frac{1}{50} \sqrt{\frac{m_{ij,min}}{k_n}} \quad (20)$$

Uma escolha inadequada do passo de tempo pode acarretar em problemas na simulação como a não detecção de contatos entre as partículas.

Alguns problemas foram detectados ao longo da implementação dos códigos para a simulação e a Figura 13 representa um deles, é o resultado de uma escolha inadequada para o valor de Δt : as partículas não tiveram suas posições corrigidas em função da atuação das forças de contato já que o intervalo de tempo não permitiu a detecção do contato, assim os discos também não detectaram o contatos com as paredes e escaparam do sistema.

Figura 13 – Representação da escolha de um Δt inadequado



3.2 Coleta e tratamento de dados

Os arquivos de saída da etapa de dinâmica molecular contêm as coordenadas de cada grão e suas respectivas forças reativas. Tais arquivos são gerados a cada 1000 passos do tempo de simulação, assim tem-se os dados ao longo de toda dinâmica até a estabilidade do sistema.

Os dados coletados foram trabalhados a fim de estudar as forças reativas de cada grão do intruso e dos grãos do sistema.

A partir dos dados de força, é possível extrair informações sobre as tensões normal e tangencial e inferir possíveis relações com as diferentes inclinações da fibra.

Todas as variáveis do sistema são normalizadas, nos códigos, a fim de padronizar e tornar o resultado o mais verossímil possível (ATMAN; CLAUDIN; COMBE, 2009).

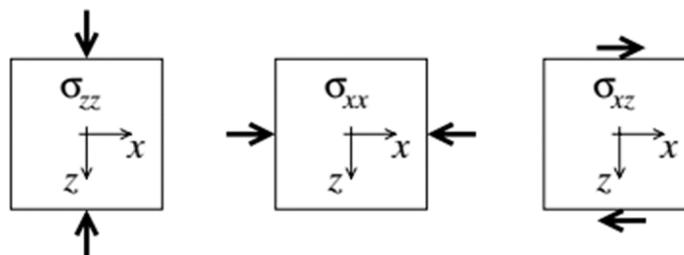
3.3 Estudo de tensões

O estudo de tensões neste trabalho está relacionado com a capacidade de extrair informações macroscópicas a partir de parâmetros microscópicos, ou seja, a partir do conhecimento das forças de contato e da geometria na escala dos grãos é possível obter uma descrição contínua de um campo de tensão. E esse *link* é muito importante quando tem-se simulações discretas com dados conhecidos (MEHTA, 2007).

Discorrer e representar a distribuição de tensões em um sistema formado por grãos não coesivos ainda é um problema muito estudado. No caso de materiais granulares, as tensões podem ser calculadas a partir das forças de contato entre os grãos do sistema (GOLDHIRSCH; GOLDENBERG, 2002).

A tensão é uma medida macroscópica e tensorial, mas quando é feita a vetorização da área e o somatório das forças pela área, obtêm-se a pressão. Dessa forma, para o caso bidimensional (Figura 14), tem-se as componentes do tensor de tensões referentes à componente da força e à direção normal à superfície na qual a força atua (MEHTA, 2007).

Figura 14 – Tensor de tensão - 2D



Fonte: Mehta (2007)

Neste trabalho foi utilizado o algoritmo *tension.c*, que traça o perfil de tensões do sistema a partir dos dados microscópicos da simulação.

O [algoritmo 3](#) calcula as componentes do tensor, com base na equação [11](#) vista na seção sobre tensões do capítulo 2, em determinada altura do sistema que é inserida na entrada dos dados.

Algoritmo 3: Cálculo e construção do perfil de tensões - *Tension*

Entrada: Configuração de forças (arquivo resultante do *Pushbox*)

Saída: Tensores de tensão $\sigma_z z \sigma_x z \sigma_x x$

início

Escolha do caso que originou o arquivo de entrada -*Box Configuration* ;

Inserir o nome do arquivo de entrada;

Inserir a altura do sensor;

Inserir o número de grãos do intruso;

Para cada grão da altura inserida **repita**

 Leitura das forças reativas;

 Cálculo das forças em x e em y;

até atingido o número de grãos;

Para intervalo das janelas deslizantes **repita**

 Cálculo dos tensores - $\sigma_{zz} \sigma_{xz} \sigma_{xx}$ **até atingido o comprimento do sistema;**

 Salva as configurações finais no arquivo;

fim

Os fundamentos da "teoria média eficaz", na qual as propriedades geométricas microscópicas dos contatos de grãos estão relacionadas a propriedades elásticas de larga escala ([MEHTA, 2007](#)), são aplicados no [algoritmo 3](#) e resultaram nos perfis de tensão que serão apresentados no capítulo a seguir.

Capítulo 4

Resultados

Os resultados foram divididos em três etapas: Preparação do Sistema, Fluxo de Grãos e Reologia do Sistema - Forças e Tensões. As etapas de apresentação dos resultados estão relacionadas às etapas da realização do trabalho.

Foram consideradas 5 amostras com diferentes condições iniciais para cada um dos 6 estados de inclinação do sistema.

4.1 Preparação do sistema

O desenvolvimento do trabalho partiu da elaboração de dois códigos para a simulação da dinâmica molecular: *prepbox.c*, correspondente à geração das condições iniciais do sistema, e o *pushbox.c*, que realiza a dinâmica do sistema, decorrente da deposição dos grãos, por gravidade, em direção à haste.

Na geração das condições iniciais foram fixados os tamanhos da caixa e dos discos, que representam os grãos de diferentes diâmetros, além da posição da fibra.

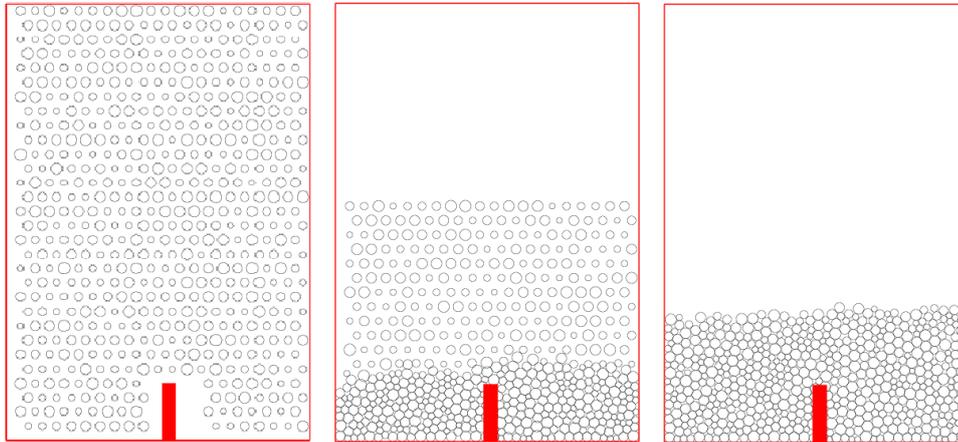
Com o auxílio de um código em linguagem C que gera uma imagem no formato *.eps* (*encapsulated postscript*) foi possível ilustrar as etapas da caixa preenchida, em função do espaço disponível (realizada no *prepbox.c*), e a caixa durante e após a aplicação do fluxo (resultantes do *pushbox.c*).

Inicialmente, uma caixa de 60×40 foi gerada com, aproximadamente, 2400 grãos, com uma fibra rígida, representada por uma barra. Na figura 15 a evolução do sistema ocorre da esquerda para a direita.

O número de grãos do sistema, neste trabalho, é determinado pelo produto das dimensões da caixa, porém, sofre pequenas variações ao longo das simulações, em função do formato e posicionamento da fibra.

A deposição dos discos, realizada com a condição inicial em que a fibra contém apenas um ponto, desenhada como um retângulo, não permitiu a identificação dos pontos de contato existentes em relação ao intruso.

Figura 15 – Representação do fluxo granular em direção à haste



Então, a fim de estudar seu comportamento e a reologia do sistema, uma outra condição inicial foi elaborada em que a fibra é um conjunto de discos de diâmetro igual a 0,25 e, portanto largura igual a 0,5 (duas colunas de discos).

Após diversas tentativas de construção de um intruso que realizasse deflexão com a aplicação do fluxo de grãos, elaborou-se 6 diferentes configurações iniciais em função da inclinação da haste (15° , 30° , 45° , 60° , 75° , 90° , da esquerda para direita) (Figura 16), para ampliar o estudo do comportamento do sistema, em diferentes situações. Visando encontrar uma relação da inclinação do intruso com a variação das forças e tensões no sistema.

Cada estado inicial foi submetido à força da gravidade e, então, diferentes resultados relativos às forças atuantes neste sistema fluido-estrutura foram obtidos.

4.2 Fluxo de grãos

Com a deposição dos grãos, por ação da força da gravidade, ocorrem os contatos entre os grãos livres do sistema e entre esses e as paredes ou a fibra, tem-se as cadeias de força entre cada contato do sistema.

Na figura 17 tem-se o estado final do sistema com a fibra na vertical e, em seguida (Figura 18), um zoom sobre a fibra em cada estado de inclinação e suas respectivas cadeias de forças, consequência da deposição dos grãos.

O estado do sistema representado nas figuras corresponde ao estado de equilíbrio alcançado nas simulações. As cadeias de forças desenhadas em cada estado são a representação da força resultante entre os contatos do sistema. Os traços vermelhos são as forças

Figura 16 – Representação das diferentes inclinações da fibra.

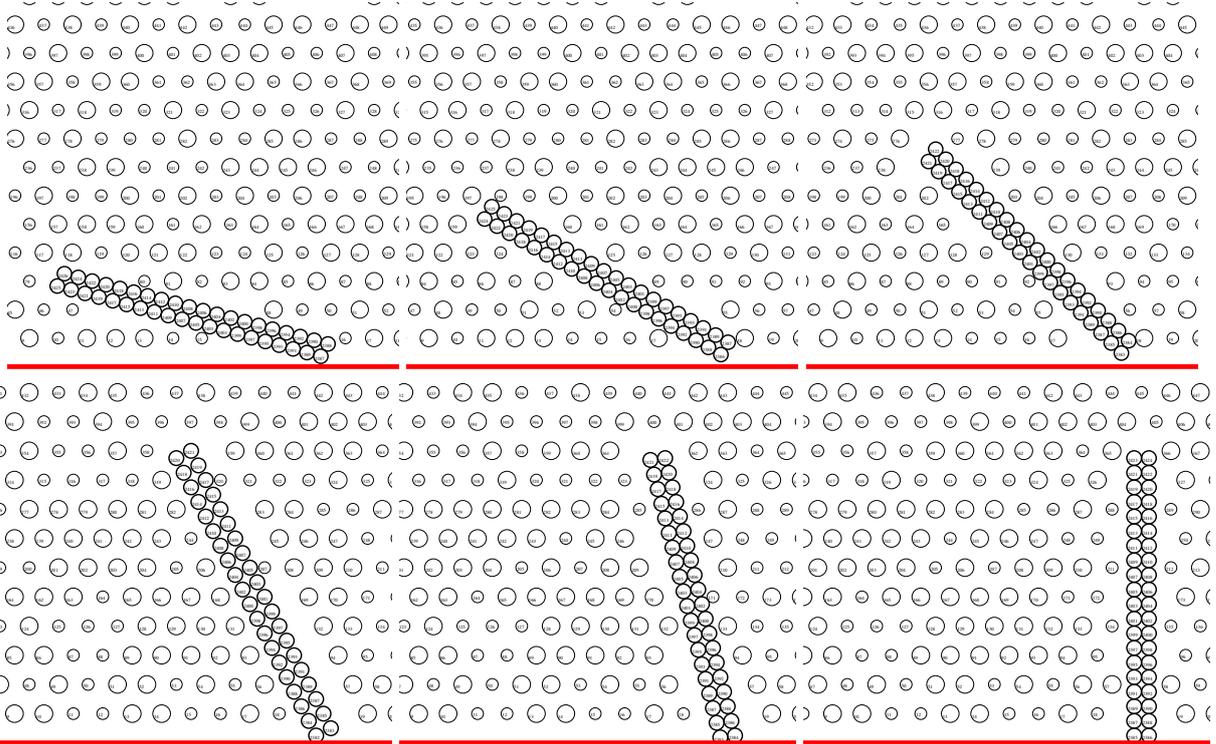
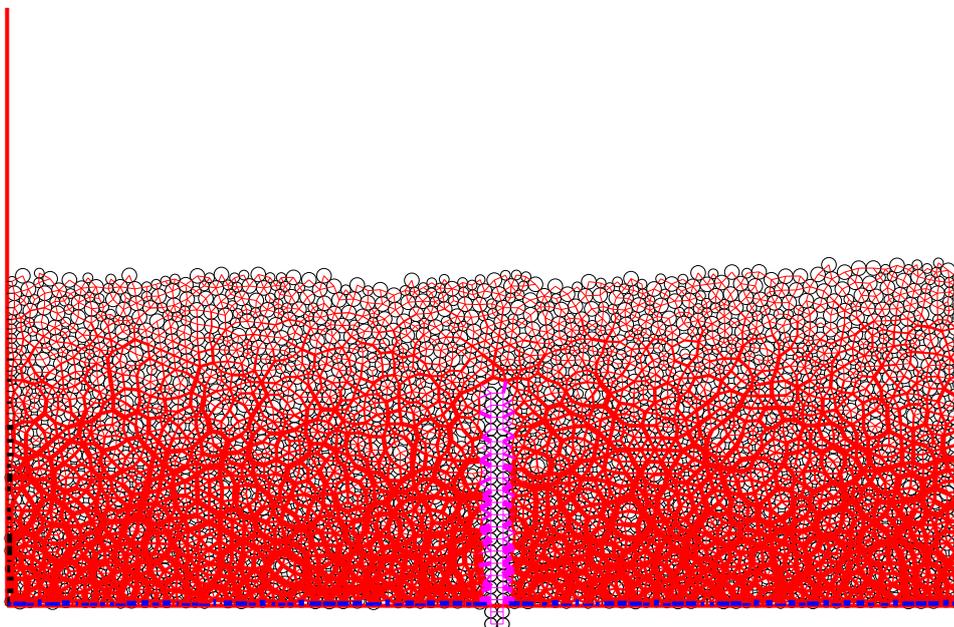
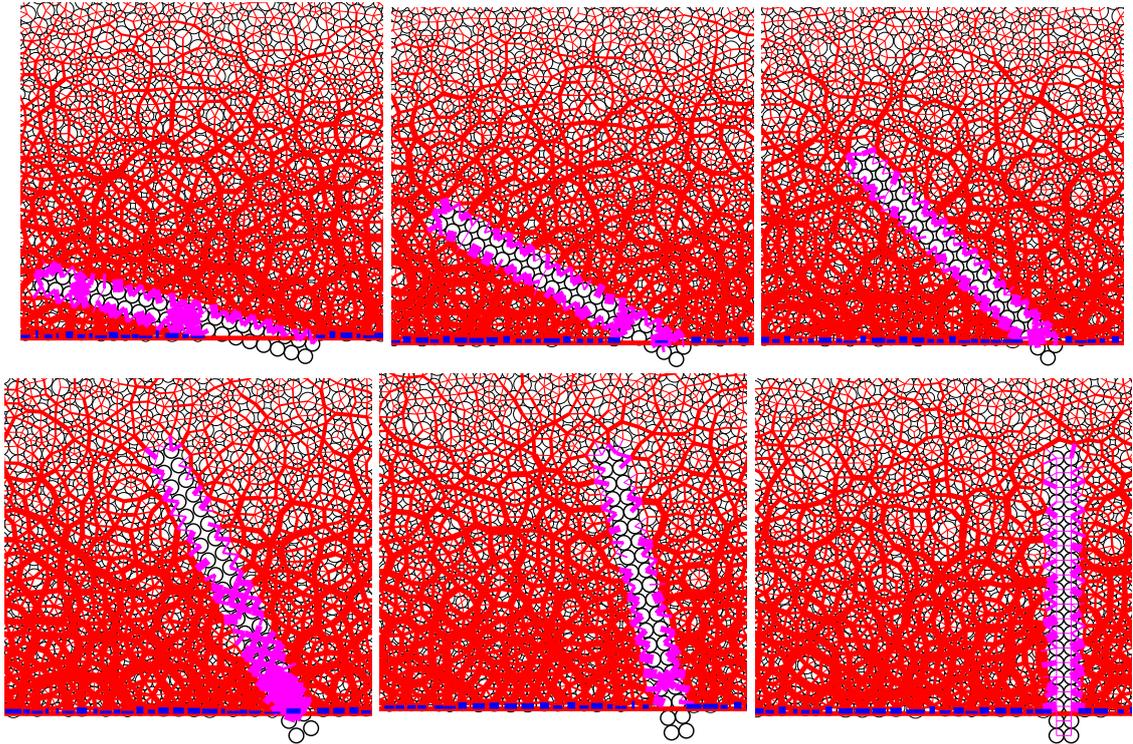


Figura 17 – Representação do estado final para o caso em que a fibra está a 90° em relação ao fundo da caixa



existentes entre os grãos livres, os traços azuis são as forças entre os grãos livres e o fundo da caixa, os contatos pretos correspondem às forças entre os grãos livres e as paredes laterais da caixa, e, por fim, as cadeias de forças na cor lilás são as forças existentes entre os grãos livres e o intruso. Além disso, espessura do traço representa a intensidade das forças.

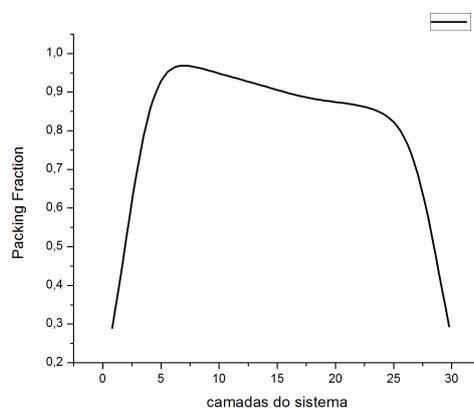
Figura 18 – Um exemplo do estado de equilíbrio para todos os casos de inclinação da fibra.



Os trechos do intruso em que há maior intensidade da cor lilás são os pontos que sofrem maior força no momento de equilíbrio do sistema. No tópico a seguir será apresentado graficamente a ação dos grãos sobre o intruso.

A fim de assegurar que o trabalho trata de um meio granular denso, fez-se a verificação do *packing fraction* após a deposição dos grãos do sistema. A figura 19 garante a afirmação já que a fração de empacotamento do sistema está acima de 0.8 ao longo das camadas do sistema e em todas as inclinações do intruso.

Figura 19 – *packing fraction* do sistema



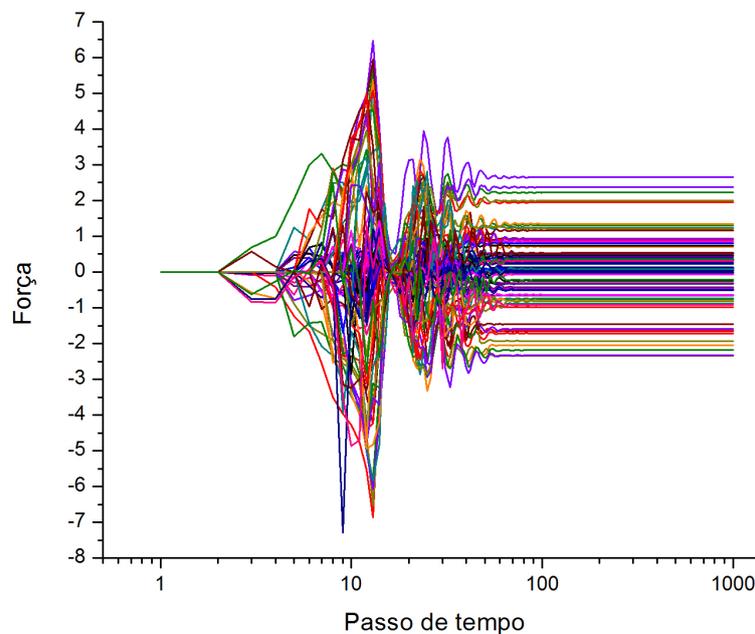
4.3 Reologia do sistema - Forças e Tensões

A resposta dos componentes do sistema fluido-estrutura foi estudada analisando os dados de forças e tensões de ambas partes. Inicialmente foi feito o estudo das forças atuantes sobre os grãos da fibra, em seus lados esquerdo e direito.

No caso em que a fibra se apresenta a 90° de inclinação, totalmente na vertical, é possível descrever a fase de deposição dos grãos ao longo do tempo de simulação, a partir das forças de contato em x e em y sobre todos os grãos do intruso (Figura 20). Pode-se identificar a fase inicial da simulação, sem muitos contatos com os grãos que compõe a fibra, em seguida, um estado transiente de tensão quando ocorrem os contatos iniciais, é observado um gargalo que pode ser justificado pela reação do contato de um grão, quicando ao tocar uma superfície. Por fim, quando a deposição cessa, observa-se um relaxamento das tensões, análogo ao movimento harmônico amortecido.

A figura 20 ilustra as componentes x e y da forças resultantes no intruso, ao longo do passo de tempo da simulação. Cada grão do intruso tem duas linhas representadas no gráfico, correspondendo às coordenadas de sua força resultante.

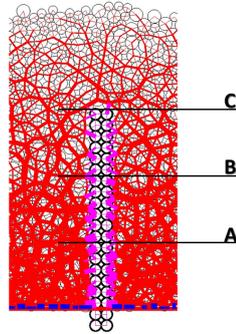
Figura 20 – Ilustração das componentes das forças resultantes nos grãos do intruso ao longo da simulação.



Os dois lados da fibra foram analisados, considerando as respostas de cada uma das colunas do intruso. Sendo assim, foram observadas diferentes respostas para cada configuração de inclinação.

Além disso, fez-se a divisão em três trechos para estudar as tensões em cada trecho da fibra, com janelas deslizantes, para compreender todo o intruso (Figura 21).

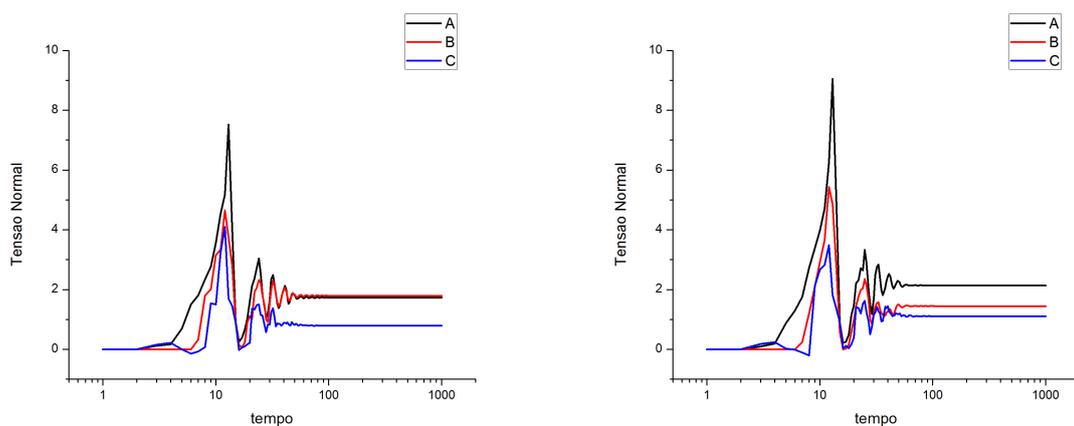
Figura 21 – Tensão normal nos três trechos da fibra.



Os gráficos a seguir, (Figura 22), ilustram a tensão Normal da configuração de 90° , nos trechos A, B e C, que vão de baixo para cima, dos lados esquerdo e direito, respectivamente. O trecho A, que corresponde ao trecho mais ao fundo da caixa tende a apresentar maior tensão normal, justificada também pela pressão hidrostática, suportando o peso e adensamento do sistema. Essa tensão também pode ser inferida pela ilustração das cadeias de força.

Ainda sobre a figura 22 uma pequena diferença da tensão normal aos grãos da fibra a 90° , entre seu lados esquerdo e direito, pode ser observada nos trechos A e B que são bem próximos à esquerda, mas à direita se diferem.

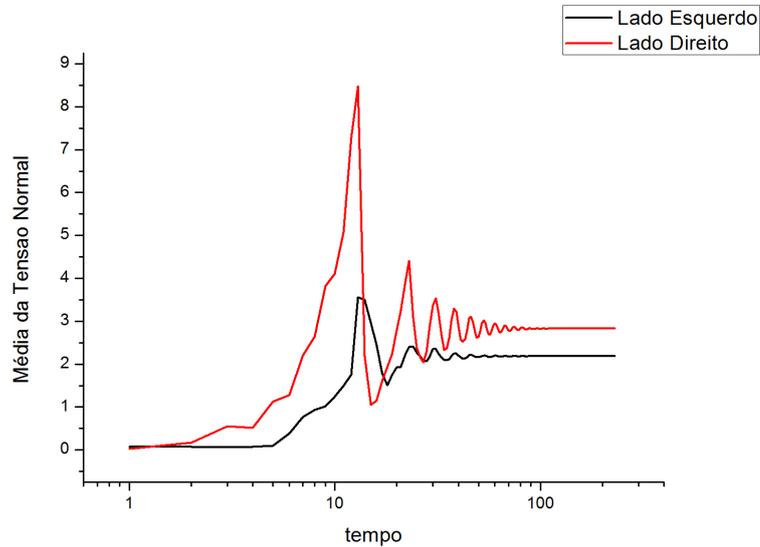
Figura 22 – Tensão normal nos três trechos da fibra. Lado esquerdo e direito, respectivamente.



Para os demais casos, em que o intruso está inclinado, a simetria entre os lados esquerdo e direito da fibra já não é mais tão forte, no que diz respeito à aplicação das forças pelos grãos do sistema. Considerando que não há interação entre os grãos do intruso, o lado direito da fibra sofre impacto da deposição de cima para baixo enquanto o esquerdo sofre a pressão exercida por eles de baixo para cima.

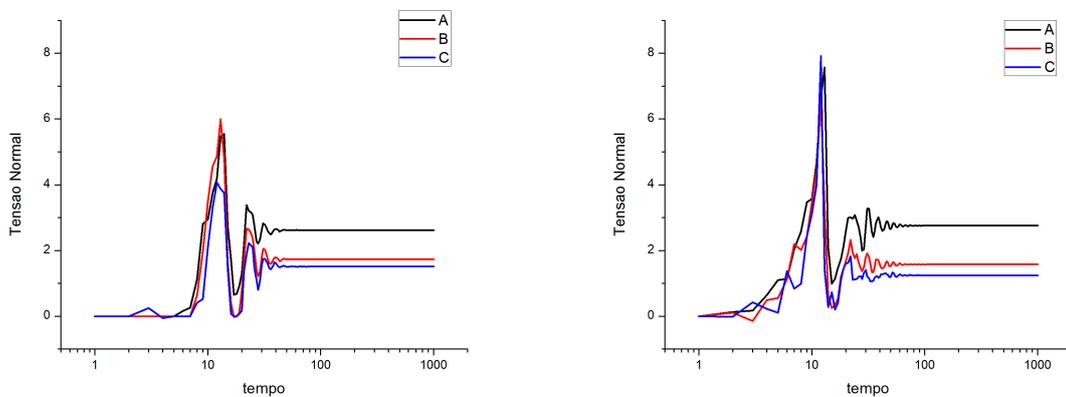
Com a inclinação de 15° da fibra, percebe-se a diferença entre as tensões dos lados esquerdo e direito, observando a média da tensão normal para cada lado (Figura 23). Levando em consideração as poucas partículas depositadas abaixo da fibra, nesta configuração.

Figura 23 – Tensão normal dos lados esquerdo e direito para inclinação de 15° .



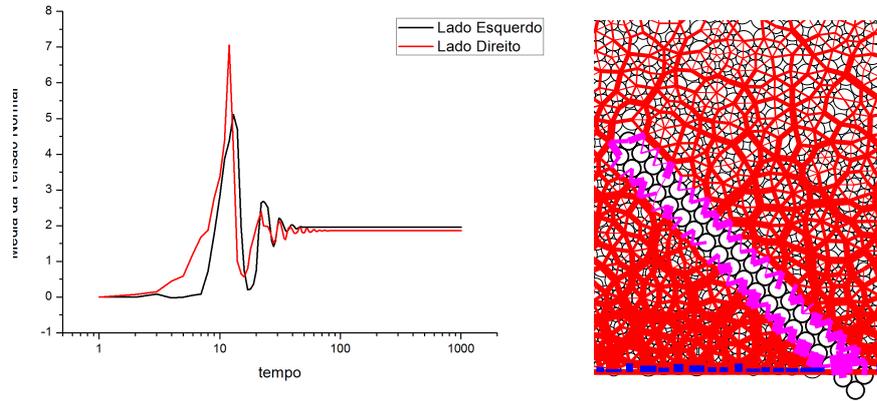
Já para o caso da inclinação de 45° da fibra, tem-se as tensões em cada trecho dos lados esquerdo e direito (Figura 24), respectivamente, que apesar de atingirem o equilíbrio em valores muito próximos em relação aos lados, o pico de tensão normal ocorreu com maior intensidade no lado direito. Justificado pelo necessário preenchimento do espaço abaixo da fibra antes de realizar tensão sobre a mesma.

Figura 24 – Tensão normal nos três trechos da fibra inclinada a 45° .



A média da tensão Normal atuante nos dois lados da fibra reitera a justificativa dada para o pico de tensão no lado direito da fibra. Na figura 25 é possível notar uma inversão, em que o lado esquerdo passa a ter um valor de tensão um pouco maior que o esquerdo, no final do tempo de simulação, quando todo o espaço abaixo da fibra já foi preenchido.

Figura 25 – Média da tensão normal dos dois lados da fibra inclinada a 45°



Considerado os três trechos da fibra (A, B e C) e seus respectivos valores finais de tensão para cada inclinação no sistema, fez-se um comparativo entre o módulo da tensão normal à esquerda e à direita, respectivamente, em função da inclinação do intruso no sistema (Figuras 26 e 27)

Figura 26 – Relação Tensão Normal e Inclinação - Lado esquerdo da fibra.

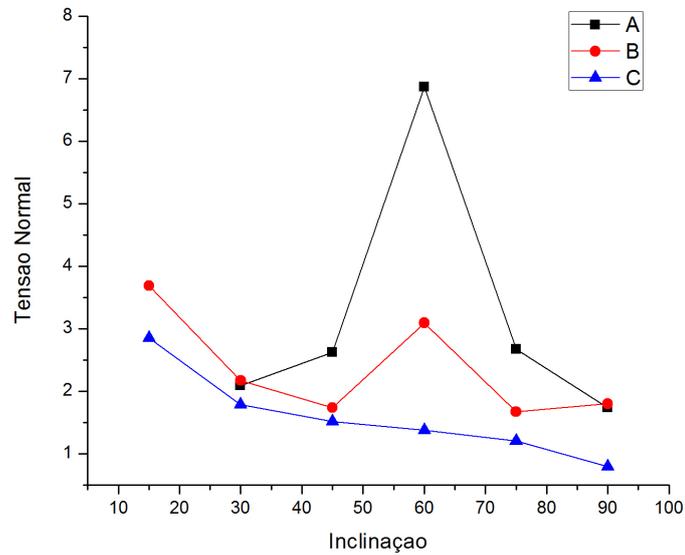
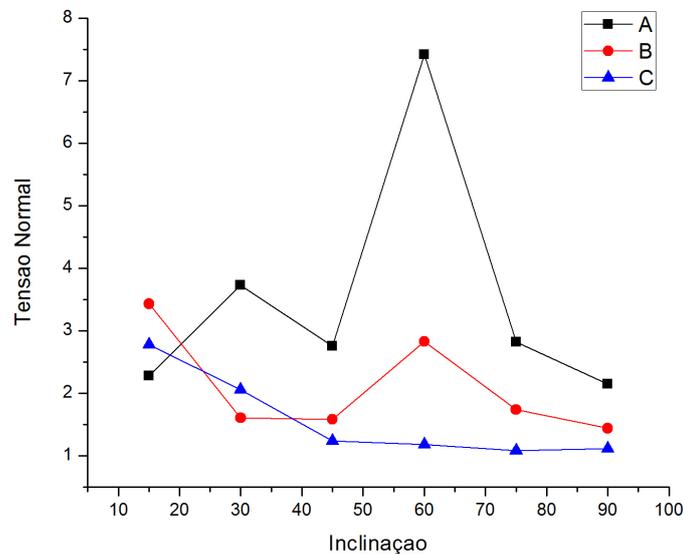


Figura 27 – Relação Tensão Normal e Inclinação - Lado direito da fibra.



Foram observados picos de tensão normal na inclinação de 60° , nos trechos mais baixos da fibra (trechos A e B), que se destacaram em relação aos demais níveis de inclinação.

A tensão normal no nível A no lado esquerdo da fibra, para a inclinação de 15° , não foi considerada por uma limitação da configuração, em que parte do trecho fica "engastada" à caixa e apresenta valor igual a 0.

Em outra análise, sobre os grãos do intruso, foi utilizado o algoritmo *tension.c*, que retorna um perfil de força e tensão para o sistema. Para este caso, o perfil corresponde ao perfil das forças em x e em y , ao longo dos grãos do intruso. As figuras 28 e 29 retratam o perfil das forças juntamente com as cadeias de força desenhadas no sistema, com a identificação de cada grão dos lados direito e esquerdo para o intruso a 90° .

É possível identificar e relacionar os pontos de maior intensidade das cadeias de força com as curvas dos gráficos. Além disso, observa-se que a força em x ao longo da fibra diminui em direção à sua extremidade livre, ou seja, menor intensidade da força x no último trecho da fibra (Figura 28).

A força exercida ao longo da direção y , porém, não segue uma relação em função dos trechos da fibra (Figura 29).

Figura 28 – Força em x nos lados esquerdo e direito do intruso.

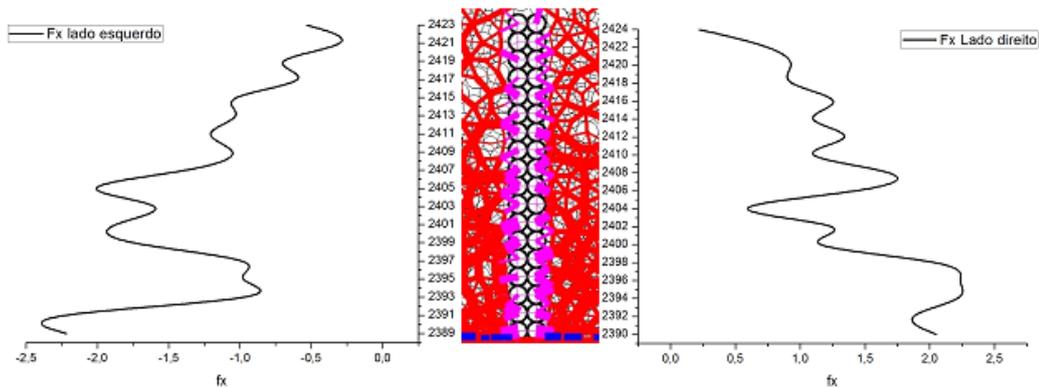
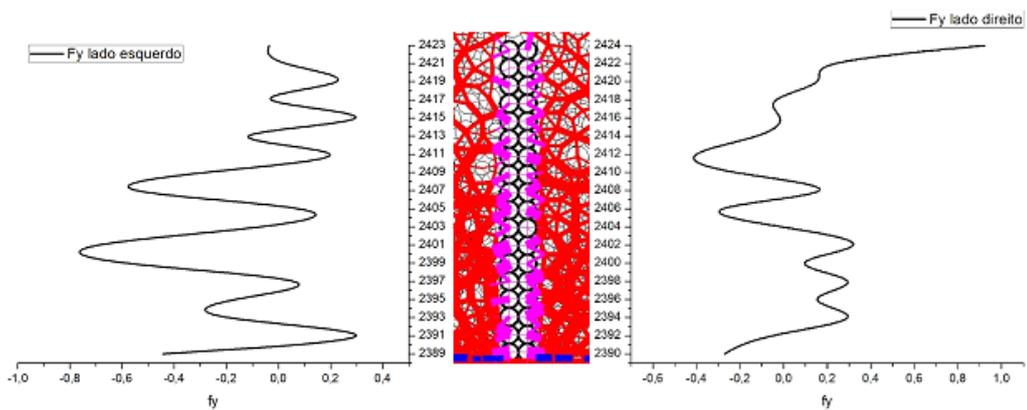


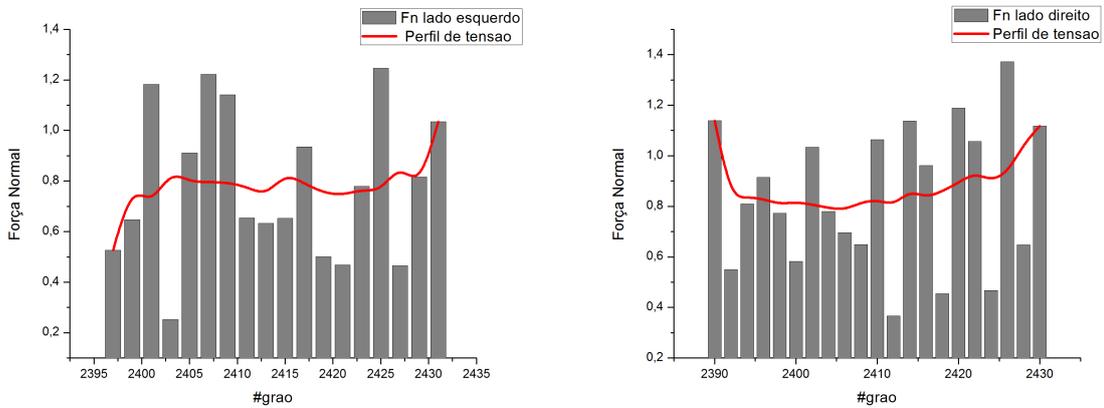
Figura 29 – Força em y nos lados esquerdo e direito do intruso.



Para a inclinação de 15° foi traçado o perfil de tensão sobre os valores de força. A seguir (Figura 30), os perfis de tensão normal para cada lado do intruso juntamente com a distribuição de forças. Dessa forma observa-se como varia um parâmetro microscópico, a força, e obtém-se um perfil de tensão na fibra, parâmetro macroscópico. Além disso, a figura 30 ilustra a aplicação da "teoria média eficaz", atenuando os picos e vales da força, traçando o perfil de tensão.

É possível observar e extrair essa relação micro-macro também para o caso de 45° de inclinação da fibra, em que o perfil de tensão pode ser considerado como uma tendência contínua. As figuras 31 e 32 ilustram as forças normal e tangencial nos lados esquerdo e direito da fibra, respectivamente, junto ao perfil de tensão da mesma.

Figura 30 – Distribuição das forças e perfil de tensão normal, nos lados esquerdo e direito da fibra.



As curvas da força tangencial nos dois lados da fibra (Figura 32) fazem alusão ao "escoamento" dos grãos sobre sua superfície inclinada. Sendo, no lado esquerdo da fibra, identificada a maior força tangencial ocorrendo no seu último trecho (trecho C), diferentemente do lado direito, em que a maior força tangencial ocorre na base da fibra, no trecho A.

Figura 31 – Força normal nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 45°.

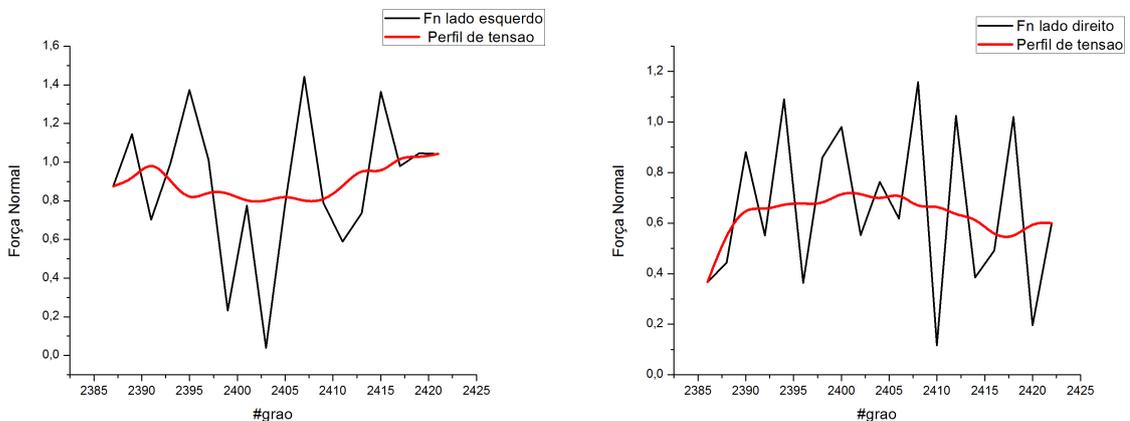
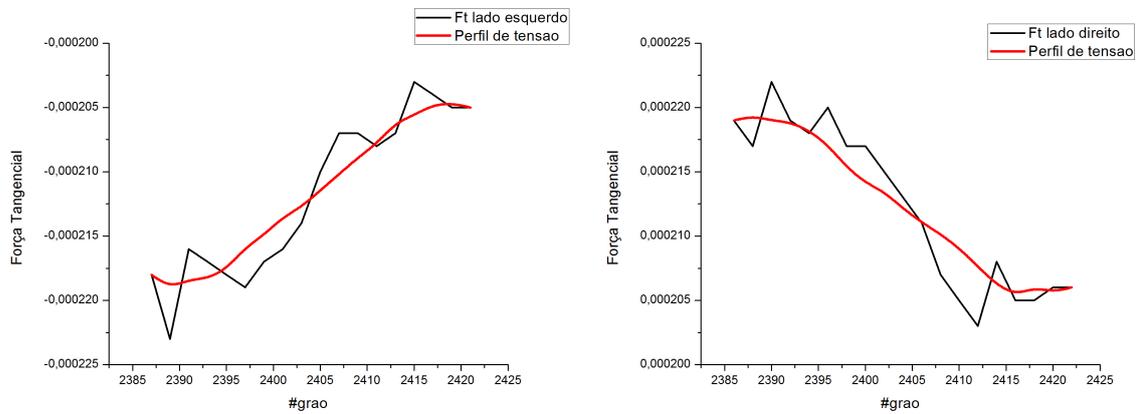


Figura 32 – Força tangencial nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 45°.



A 60° de inclinação da fibra, em que foram identificados picos de tensão nas figuras 26 e 27, foi observado um perfil de tensão um pouco mais diferente em relação às outras inclinações (Figura 33 e Figura 34).

Figura 33 – Força normal nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 60°.

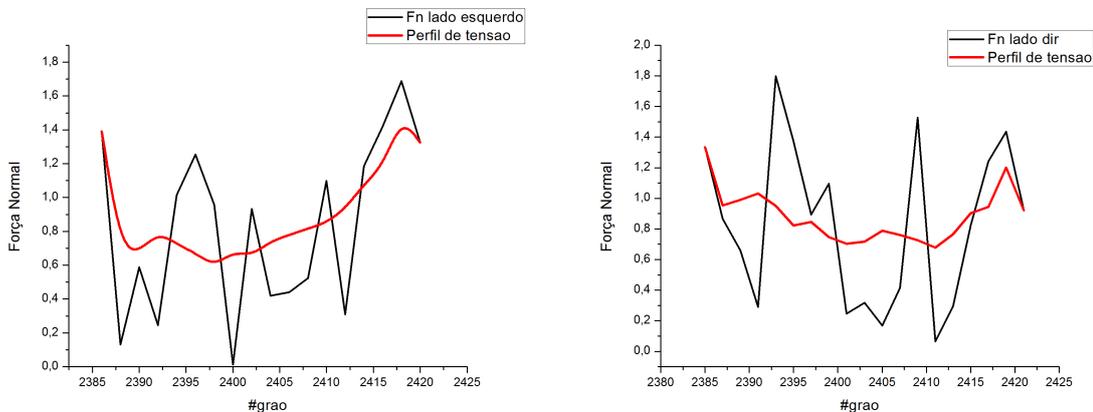
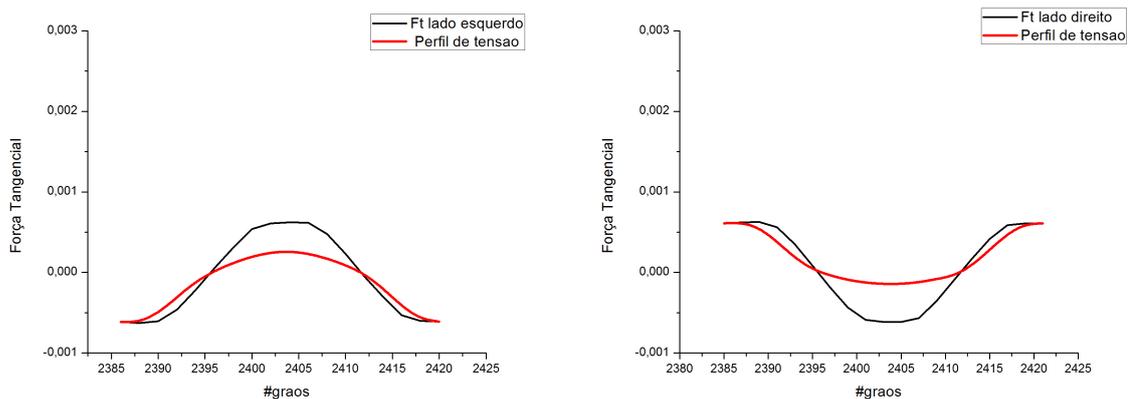


Figura 34 – Força tangencial nos lados esquerdo e direito e perfis de tensão no intruso a 60°.

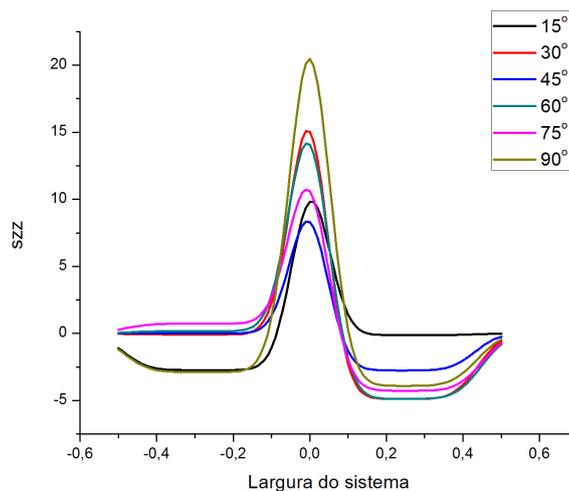


Fazendo ainda uso do algoritmo *tension.c*, elaborado para calcular o perfil das tensões ao longo do sistema a partir da função de *coarse graining*, obteve-se o perfil de todo o sistema, não apenas para os grãos do intruso.

O algoritmo é capaz de traçar o perfil de todo o sistema para diferentes alturas, portanto foi feito um estudo traçando um perfil do sistema em diferentes alturas (correspondentes ao percentual da extensão linear horizontal do sistema (ATMAN; CLAUDIN; COMBE, 2009)), para cada configuração de inclinação da fibra.

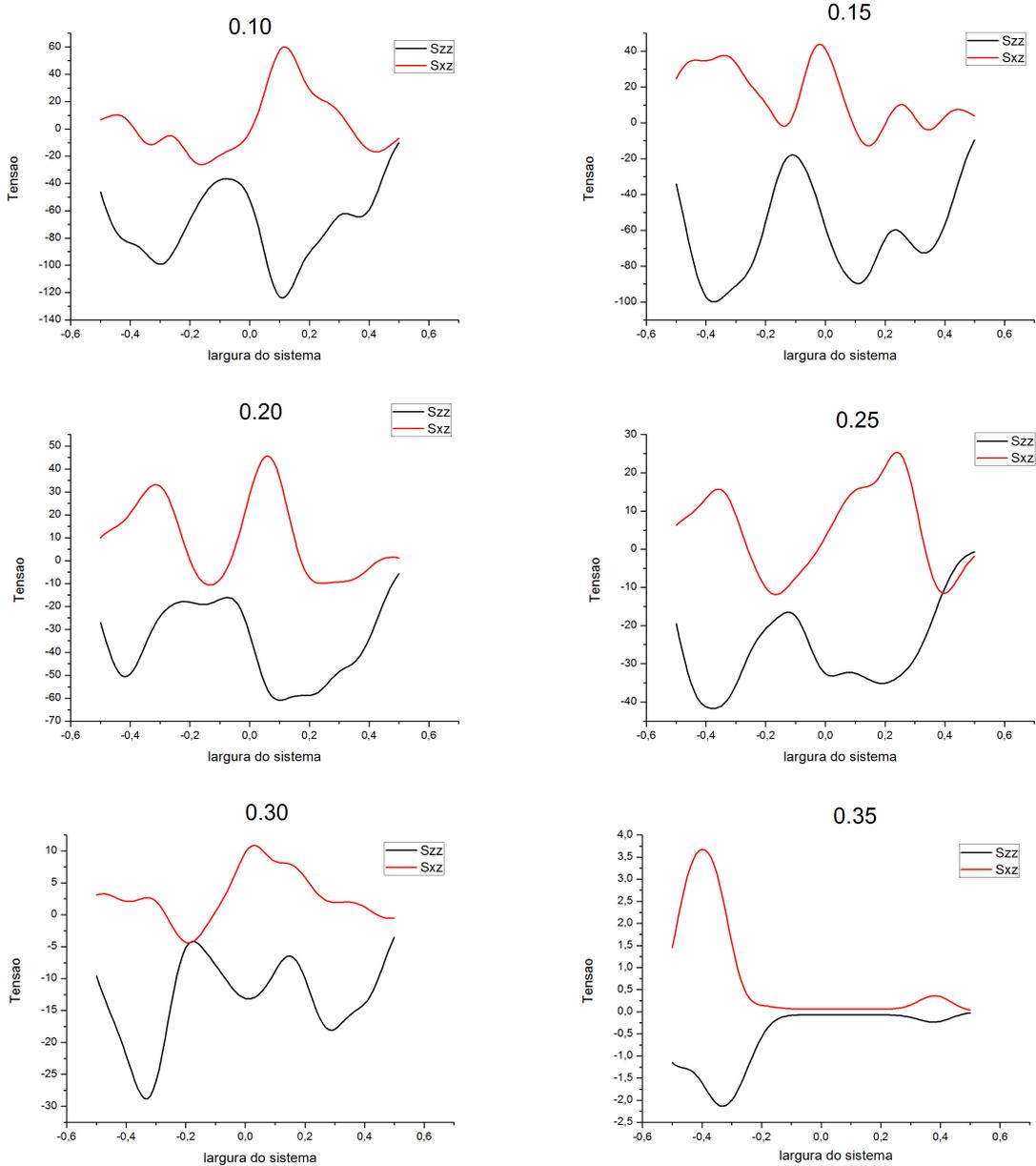
Considerando o fundo da caixa - altura 0.0 do sistema -, o parâmetro de tensão normal da função, σ_{zz} , para cada inclinação do sistema, foi representado na figura 35. Entre as curvas de σ_{zz} de cada configuração do intruso é possível identificar que, o maior valor ocorre com a fibra posicionada a 90° , quando não existe sombra no fundo da caixa, já a 45° de inclinação, o fundo da caixa, no centro do sistema, sofre a menor tensão normal.

Figura 35 – σ_{zz} - Tensão Normal medida no fundo da caixa, em cada inclinação da fibra



Para a inclinação de 60° foram obtidos os seguintes perfis de σ_{zz} e σ_{xz} , para as alturas estudadas - 0, 1; 0, 15; 0, 2; 0, 25; 0, 3; 0, 35. (Figura 36).

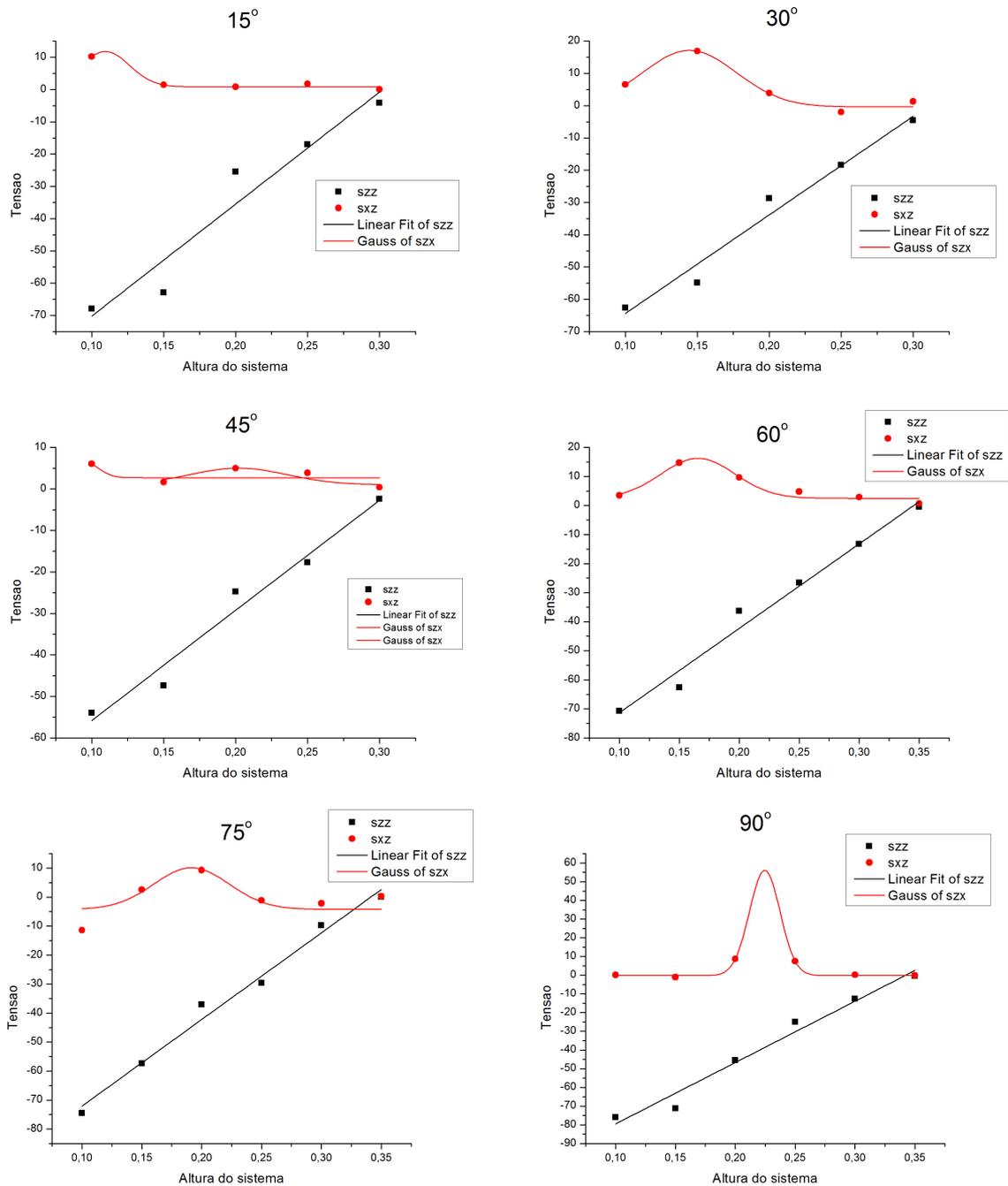
Figura 36 – Perfis de σ_{zz} e σ_{xz} da fibra inclinada a 60°.



A partir desses perfis de cada inclinação fez-se a média estatística sobre todos os grãos analisados e obteve-se as seguintes relações entre σ_{zz} e σ_{xz} , ou tensão normal e tangencial, em função da altura do sistema, para cada inclinação (15°, 30°, 45°, 60°, 75°, 90°, respectivamente) (Figura 37).

A curva da tensão tangencial a 45° indica que esta é a configuração que apresenta menor variação ao longo da altura do sistema (Figura 37).

Figura 37 – Relação das tensões σ_{zz} e σ_{xz} em função da altura analisada no sistema para cada caso de inclinação da fibra - 15°, 30°, 45°, 60°, 75°, 90°, respectivamente.



A partir de então, fez-se a relação da inclinação dos ajustes lineares e do centro das gaussianas com a inclinação do intruso, a fim de ilustrar o comportamento das tensões normal e tangencial em função da inclinação do intruso.

Foi realizada uma regressão linear para tensão tangencial do sistema em relação à inclinação do intruso (Figura 38) e um ajuste polinomial de 3ª ordem para a tensão normal (Figura 39), foi adotado o ajuste polinomial de 3ª ordem por de adequar melhor aos pontos do gráfico.

Figura 38 – Tensão tangencial x Inclinação da fibra.

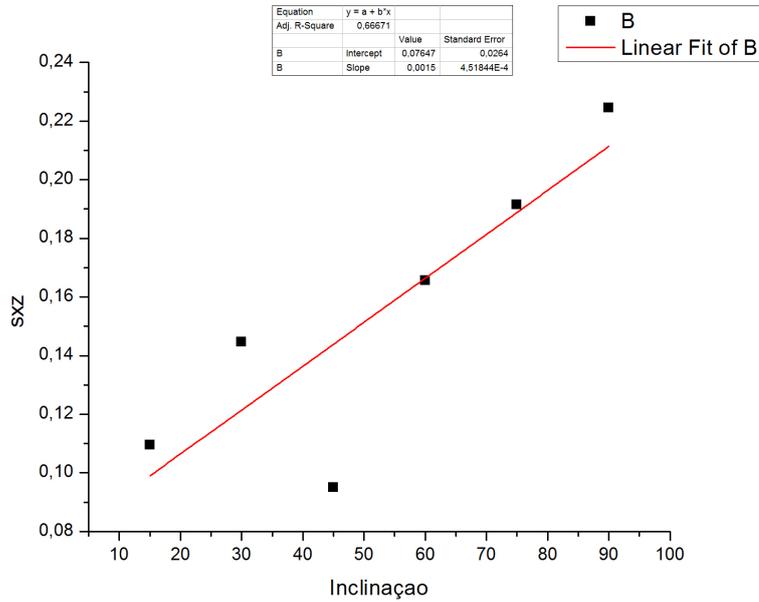
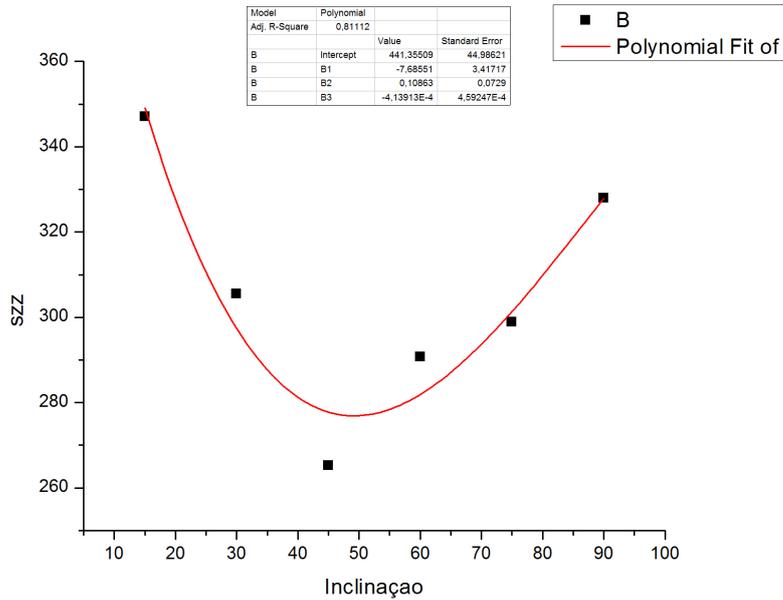


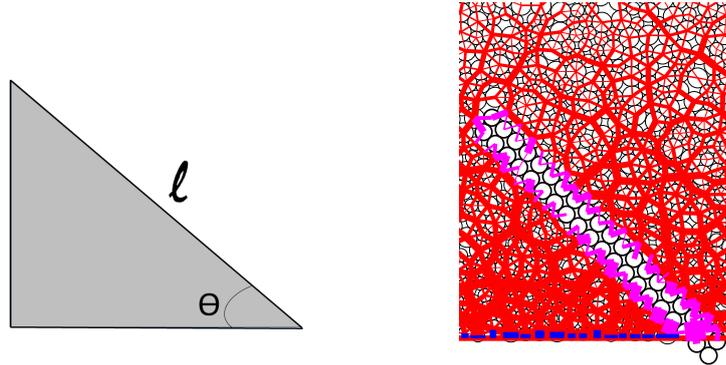
Figura 39 – Tensão normal x Inclinação da fibra.



As figuras 38 e 39 apontam baixos valores de tensão na configuração em que a fibra está inclinada a 45°, tanto a tensão normal quanto tangencial. Isso pode ser explicado pelo fato de que o ângulo de 45° de inclinação do intruso proporciona a maior área possível sob a fibra (Equação 21 e Figura 40).

$$area = \left(\frac{l^2}{2} \cdot \sin\theta \cdot \cos\theta\right) \quad (21)$$

Figura 40 – Área sob a fibra inclinada a 45°



Fez-se então a busca pelo máximo da função da área sob a fibra. Sendo, θ , a inclinação da fibra e l , o seu comprimento:

$$\frac{darea}{d\theta} = \frac{l^2}{2} \cdot (\cos^2\theta - \sin^2\theta) = 0 \quad ; \quad l > 0 \quad (22)$$

$$\cos^2(\theta) = \sin^2\theta \quad ; \quad 0 < \theta < \frac{\pi}{2}$$

$$\theta = \frac{\pi}{4}$$

Portanto, fazendo $\theta = \frac{\pi}{4}$, tem-se um ponto de máximo da função, sendo sua derivada primeira igual a 0 e sua derivada segunda, negativa (Equação 23).

$$\frac{d^2area}{d\theta^2} = -2l^2 \cdot \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = -l^2 \quad (23)$$

Sendo assim, menor é a pressão de confinamento dos grãos abaixo da fibra, pois não é sentido o peso do restante do sistema. Conseqüentemente, a configuração de 45° é a que maximiza a área e minimiza a tensão do sistema.

Capítulo 5

Conclusão

O estudo do comportamento de uma fibra em um meio granular para a construção de um modelo computacional realístico visando simular a penetração de raízes no solo foi realizado, porém o modelo ainda está em fase de elaboração.

Foram estudadas algumas propriedades microscópicas que permitiram extrair propriedades macroscópicas do sistema fluido-estrutura, por meio das relações de força e tensão em duas dimensões, para o caso de a estrutura ser uma fibra em meio granular e em diferentes condições.

Algumas discussões importantes que ainda podem ser levantadas por meio dos gráficos apresentados nos resultados deste trabalho são os baixos valores de tensão na configuração em que a fibra está inclinada a 45° .

Analisando, de maneira geral, as curvas da tensão tangencial neste sistema fluido-estrutura, pode-se inferir um comportamento quase monotônico da tensão tangencial.

O trabalho apresentou resultados preliminares importantes que estimulam a sua continuidade, por meio do estudo da relação entre dois tipos de componentes que formam o sistema fluido-estrutura.

Após inúmeras tentativas para fazer o intruso realizar deflexão durante a simulação, a lógica foi repensada e fez-se o estudo da fibra rígida em diferentes configurações de inclinação, buscando compreender a resposta do sistema fluido-estrutura. Outros problemas foram encontrados durante a construção do código para a realização da dinâmica molecular, como a escolha do passo de tempo e a interação do intruso formado por partículas, contudo foram superados, o que permitiu a realização do estudo de forças e tensões atuantes no sistema.

Como perspectivas de continuidade do trabalho, pretende-se gerar uma configuração inicial para que o intruso sofra deflexão durante a simulação, a fim de se assemelhar à raiz de uma planta penetrando no solo. Com a fibra flexível, portanto, é pensado que a simulação seja

realizada em condição periódica de contorno, na vertical, representando o fluxo contínuo de grãos, tornando o modelo computacional o mais próximo do modelo experimental de [Algarra \(2016\)](#), tomado como base. Além disso, pretende-se estudar outros parâmetros e propriedades específicas do meio e do intruso, como a composição dos materiais.

Acredita-se que, através deste trabalho, analisando as forças atuantes sobre a haste e as forças reativas sobre os discos do meio granular, foi possível dar início ao projeto de representação da dinâmica e construção do modelo computacional realístico da penetração de uma raiz no solo, por meio da Dinâmica Molecular.

Referências

ALGARRA, N. et al. Flexible fiber in interaction with a dense granular flow close to the jamming transition. In: EDP SCIENCES. **EPJ Web of Conferences**. [S.l.], 2017. v. 140, p. 14002. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 12.

ALGARRA, N. P. **Pénétration d'une fibre flexible dans un milieu granulaire dense**. Tese (Doutorado) — Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2016. Citado 8 vezes nas páginas 1, 2, 3, 11, 12, 13, 14 e 46.

ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. **Computer simulation of liquids**. [S.l.]: Oxford university press, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 5, 6, 7 e 8.

ANDREOTTI, B.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. **Granular Media: Between Fluid and Solid**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado na página 9.

ATMAN, A.; CLAUDIN, P.; COMBE, G. Departure from elasticity in granular layers: Investigation of a crossover overload force. **Computer physics communications**, Elsevier, v. 180, n. 4, p. 612–615, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 40.

BARÉS, J. et al. Experimental observations of root growth in a controlled photoelastic granular material. In: EDP SCIENCES. **EPJ Web of Conferences**. [S.l.], 2017. v. 140, p. 14008. Citado na página 12.

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. Citado na página 1.

CAMARGO, O. d.; ALLEONI, L. **Efeitos da compactação no crescimento de plantas**. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.

CEJAS, C. et al. Root growth in 2d wet granular media modified by intrusions. In: **Pesticide Formulation and Delivery Systems: 33rd Volume, "Sustainability: Contributions from Formulation Technology"**. [S.l.]: ASTM International, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 10.

CLARK, A. H. et al. Nonlinear force propagation during granular impact. **Physical review letters**, APS, v. 114, n. 14, p. 144502, 2015. Citado na página 12.

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. Citado na página 1.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. **geotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979. Citado na página 21.

DURAN, J. **Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 19.

FAKIH, M. et al. Modeling root growth in granular soils: effects of root stiffness and packing fraction. In: EDP SCIENCES. **EPJ Web of Conferences**. [S.l.], 2017. v. 140, p. 14013. Citado na página [12](#).

FILHO, J. T. C.; STACCIARINI-SERAPHIN, E. Alteração no potencial osmótico e teor de carboidratos solúveis em plantas jovens de lobeira (*solanum lycocarpum* st.-hil.) em resposta ao estresse hídrico. **Revista brasileira de Botânica**, SciELO Brasil, v. 24, n. 2, p. 199–204, 2001. Citado na página [10](#).

GENNES, P.-G. de. Granular matter: a tentative view. **Reviews of modern physics**, APS, v. 71, n. 2, p. S374, 1999. Citado na página [4](#).

GOLDHIRSCH, I.; GOLDENBERG, C. On the microscopic foundations of elasticity. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 9, n. 3, p. 245–251, 2002. Citado na página [25](#).

GOSELIN, F.; LANGRE, E. D.; MACHADO-ALMEIDA, B. A. Drag reduction of flexible plates by reconfiguration. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 650, p. 319–341, 2010. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [12](#).

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. Citado 3 vezes nas páginas [1](#), [10](#) e [11](#).

JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. **Reviews of modern physics**, APS, v. 68, n. 4, p. 1259, 1996. Citado na página [2](#).

LAUGA, E.; POWERS, T. R. The hydrodynamics of swimming microorganisms. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 72, n. 9, p. 096601, 2009. Citado na página [12](#).

MAGALHAES, C. F. M. Engarrafamento e segregação em empilhamentos abertos de graos. 2013. Citado 10 vezes nas páginas [4](#), [5](#), [6](#), [7](#), [8](#), [17](#), [19](#), [20](#), [21](#) e [23](#).

MEHTA, A. **Granular physics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. Citado 3 vezes nas páginas [9](#), [25](#) e [27](#).

MIDI, G. On dense granular flows. **European Physical Journal E–Soft Matter**, Springer, v. 14, n. 4, 2004. Citado na página [11](#).

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: ANAIS. UBERLÂNDIA: SBCS: UFU: ICIAG, 2011. **Embrapa Soja-Artigo em anais de congresso (ALICE)**. [S.l.]. Citado na página [10](#).

NEDDERMAN, R. M. **Statics and kinematics of granular materials**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. Citado na página [2](#).

O'HERN, C. S. et al. Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder. **Physical Review E**, APS, v. 68, n. 1, p. 011306, 2003. Citado 2 vezes nas páginas [4](#) e [5](#).

RAMANANARIVO, S.; GODOY-DIANA, R.; THIRIA, B. Rather than resonance, flapping wing flyers may play on aerodynamics to improve performance. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 108, n. 15, p. 5964–5969, 2011. Citado na página [12](#).

RAPAPORT, D. C. et al. The art of molecular dynamics simulation. **Computers in Physics**, AIP Publishing, v. 10, n. 5, p. 456–456, 1996. Citado na página [5](#).

RINO, J. P. **Materiais Granulares**. [S.l.]: Sociedade Brasileira de Física, 2001. v. 2. Citado 3 vezes nas páginas [2](#), [4](#) e [5](#).

SCAPINELLI, A. et al. Root system and productive components of the sunflower in a compacted soil. **Bragantia**, SciELO Brasil, v. 75, n. 4, p. 474–486, 2016. Citado na página [10](#).

SCHOUVEILER, L.; BOUDAUD, A. The rolling up of sheets in a steady flow. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 563, p. 71–80, 2006. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [12](#).

SIGAUD, L. M. **Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares Densos**. Tese (Doutorado) — PUC-Rio, 2009. Citado 2 vezes nas páginas [2](#) e [6](#).

SILVA, A. P. d.; IMHOFF, S.; KAY, B. Plant response to mechanical resistance and air-filled porosity of soils under conventional and no-tillage system. **Scientia Agricola**, SciELO Brasil, v. 61, n. 4, p. 451–456, 2004. Citado na página [11](#).

TAYLOR, H. M.; ROBERSON, G. M.; JR, J. J. P. Soil strength-root penetration relations for medium-to coarse-textured soil materials. **Soil science**, LWW, v. 102, n. 1, p. 18–22, 1966. Citado na página [11](#).

VERLET, L. Computer"experiments"on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. **Physical review**, APS, v. 159, n. 1, p. 98, 1967. Citado na página [16](#).

WIERSUM, L. The relationship of the size and structural rigidity of pores to their penetration by roots. **Plant and soil**, Springer, v. 9, n. 1, p. 75–85, 1957. Citado na página [10](#).