

UM MODELO DISCRETO DE PARTÍCULAS 3D PARA O ESTUDO DA FRATURA EM ROCHA: CALIBRAÇÃO DOS PARÂMETROS MICROMECAÑICOS

A 3D DISCRETE PARTICLE MODEL FOR ROCK FRACTURE: MICROMECHANICAL PARAMETERS CALIBRATION

Monteiro Azevedo, Nuno; *Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC), Av. do Brasil 101, 1700-066 Lisboa, Portugal, nazevedo@lnec.pt*

Candeias, Marilene; *Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC), Av. do Brasil 101, 1700-066 Lisboa, Portugal, mcandeias@lnec.pt*

RESUMO

Os modelos detalhados de partículas, MP, ao terem em consideração a estrutura granular da rocha incluem de forma explícita a aleatoriedade do material e introduzem um tamanho limite à localização do dano. Neste trabalho é apresentado um modelo de partículas rígidas esféricas que tem sido desenvolvido tendo em vista o estudo da fratura em betão e em rocha. A interação entre partículas é definida com base na estrutura de Voronois dos centros de gravidade das partículas esféricas. Adota-se um modelo de contacto múltiplo, no qual a área da superfície de contacto é dada pela área da faceta comum dos Voronois associados a cada partícula. Vários estudos paramétricos são apresentados de modo a demonstrar a influência dos parâmetros micromecânicos, elásticos e resistentes, na resposta macroscópica dos sistemas de partículas.

ABSTRACT

Detailed particle models, PM, by taking into account the material grain structure, consider explicitly the randomness of material and include a size limiter for damage location. In this work a spherical rigid particle model is presented that has been developed to study the fracture in concrete and in rock. The interactions between particles are defined through the Voronoi structure generated from the spherical particles centers of gravity. A multiple contact model is adopted, in which the contact surface area is given by the common facet of the particle associated Voronois. Several parametric studies are presented to demonstrate the influence of the micromechanical parameters, elastic and strength, on the macroscopic response of particle assemblies.

1 - INTRODUÇÃO

Desde o final do século XX, modelos detalhados de partículas 2D, MP, têm sido adotados na modelação da fratura no betão e em rocha (Meguro e Hakuno, 1989; Schlangen e Garboczi, 1997; Potyondy e Cundall, 1996). Mais recentemente, têm sido apresentados diversos modelos 3D para o estudo da fratura em rocha e no betão (Liliu e Van Mier, 2003; Potyondy e Cundall, 2004; Hentz et al., 2004; Wang e Tonon 2009; Azevedo e Lemos, 2013).

Os modelos MP, ao terem em conta a estrutura granular e a heterogeneidade do material, incluem um tamanho limite à localização do dano e permitem reproduzir padrões de fendilhação e comportamentos macroscópicos semelhantes aos observados em ensaios laboratoriais em rocha e betão. Os modelos MP são conceptualmente mais simples do que os modelos baseados numa abordagem contínua, e, ao terem como base uma idealização de meio descontínuo, o desenvolvimento de superfícies de rotura ocorre naturalmente. Com base em leis de interação simples entre partículas, é possível gerar um material sintético que possui um comportamento global complexo próximo do expectável em rocha.

No MP, 2D e 3D, proposto por Potyondy e Cundall (2004), MPC, é adotado o modelo de contacto pontual para a simulação da interação entre partículas, em paralelo com um modelo que permite a transmissão de momentos através de uma mola com rigidez rotacional para a simulação do material de ligação. O modelo proposto por Potyondy e Cundall (2004) não permite simular corretamente os resultados experimentais obtidos em rocha, nomeadamente, a relação entre a resistência à compressão e à tração uniaxial, bem como o ângulo de atrito macroscópico obtido com base em ensaios triaxiais. Para reduzir este efeito, outras técnicas foram propostas, entre as quais a formação de geometrias mais complexas através de aglomerados de partículas circulares (Cho et al., 2007), ou a adoção de partículas poligonais, (Potyondy, 2010; Kazerani e Zhao, 2010; Lan et al., 2010; e Kazerani, 2011). Os modelos MP baseados em aglomerados de partículas circulares ou em partículas poligonais são computacionalmente exigentes, e por este motivo apenas têm sido aplicados em 2D.

Em Wang e Tonon (2009) é apresentado um modelo MP de partículas esféricas que permite modelar a envolvente de rotura triaxial de uma rocha granítica. A melhoria no desempenho do modelo está associada ao acréscimo do número de contactos por partícula, quando comparado ao existente no modelo proposto por Potyondy e Cundall (2004). No entanto o modelo proposto não é capaz de reproduzir a relação entre a resistência à compressão e a resistência à tração uniaxial.

Neste artigo é apresentado um modelo de partículas 3D que tem sido desenvolvido tendo em vista o estudo da fratura em rocha VMCG-3D (Azevedo e Lemos, 2013). Os sistemas de partículas são gerados com base num algoritmo de geração de partículas poligonais baseado na estrutura de Voronois de Laguerre (Okabe et al., 1992), dos centros de gravidade das partículas esféricas previamente inseridas. O modelo de partículas poligonais é aproximado através de partículas esféricas que interagem entre si através de um esquema de contacto múltiplo, sendo a localização e a altura de cada contacto definidas com base na estrutura de Voronois de Laguerre.

Apresenta-se ainda um estudo paramétrico para caracterização dos parâmetros introduzidos no modelo de elementos discretos VMCG-3D e analisa-se a sua influência no comportamento macroscópico do material, nomeadamente na resistência à compressão e à tração, atrito interno e coesão. Os microparâmetros analisados incluem o módulo de elasticidade do material contínuo equivalente, a rigidez normal e tangencial do contacto e o coeficiente de atrito do contacto entre partículas.

A calibração do modelo foi realizada com base em resultados de ensaios experimentais de compressão triaxial e ensaios do tipo Brasileiro, realizados em amostras de granito ocelar (Kazerani e Zhao, 2010). Os resultados obtidos foram ainda comparados com análises numéricas realizadas por Kazerani e Zhao (2010), num modelo de partículas poligonais com base no programa Itasca-UDEC (2004).

2 - FORMULAÇÃO

2.1 - Fundamentos

No MP a solução numérica é obtida através da aplicação de leis força-deslocamento e da segunda lei de Newton, para a determinação das forças nos contactos e da nova posição das partículas, respetivamente. As forças são obtidas por integração das equações do movimento, de forma explícita, com base no método das diferenças centrais.

A lei do movimento, incluindo amortecimento não viscoso, é dada pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} F_i(t) + F_i^d(t) &= m \ddot{x}_i \\ M_i(t) + M_i^d(t) &= I \ddot{\omega}_i \end{aligned} \quad [1]$$

em que: $F_i(t)$ e $M_i(t)$ correspondem, respetivamente, à força e momento totais, aplicados no instante t ; m e I à massa e momento de inércia da partícula; \ddot{x}_i à aceleração da partícula e $\ddot{\omega}_i$ à aceleração angular da partícula. A força e o momento resultantes do amortecimento local são determinados através das seguintes expressões:

$$\begin{aligned} F_i^d(t) &= -\alpha |F_i(t)| \operatorname{sign}(\dot{x}_i) \\ M_i^d(t) &= -\alpha |M_i(t)| \operatorname{sign}(\dot{\omega}_i) \end{aligned} \quad [2]$$

Correspondendo o parâmetro α ao coeficiente de amortecimento local não viscoso e sendo a função $\operatorname{sign}(x)$ dada por:

$$\operatorname{sign}(x) = \begin{cases} +1, & x > 0 \\ -1, & x < 0 \\ 0, & x = 0 \end{cases} \quad [3]$$

Este tipo de amortecimento não é proporcional à velocidade tal como o amortecimento viscoso, mas sim à magnitude da força total desequilibrada e com sentido oposto ao movimento associado ao passo de cálculo anterior. A integração da equação do movimento é realizada de forma explícita, recorrendo ao método das diferenças centrais (Azevedo, 2003).

Modelo de contacto VMCG-3D

O modelo de contacto VMCG-3D é definido com base no modelo MCG-2D que admite um ou mais pontos de contacto locais, situados ao longo do plano de contacto, que permitem a transmissão de forças e momentos (Azevedo e Lemos, 2005). Ao contrário do modelo de contacto pontual tradicional, MCP, em que o contacto apenas permite a transmissão de forças.

No modelo de contacto VMCG-3D, a superfície de contacto entre as partículas é cilíndrica, de diâmetro \bar{D} , com várias camadas circulares e vários pontos locais Figura 1. O número de camadas e o número total de pontos locais por camada são parâmetros do modelo, em geral adota-se uma distância constante entre camadas (h). Em cada camada adota-se um espaçamento constante igual a θr , em que r é o raio associada à camada. O vetor unitário normal à superfície do contacto é determinado recorrendo à posição dos centros de gravidade das partículas, x_i , e à distância entre eles, d , de acordo com a seguinte expressão:

$$n_i = \frac{x_i^{[B]} - x_i^{[A]}}{d} \quad [4]$$

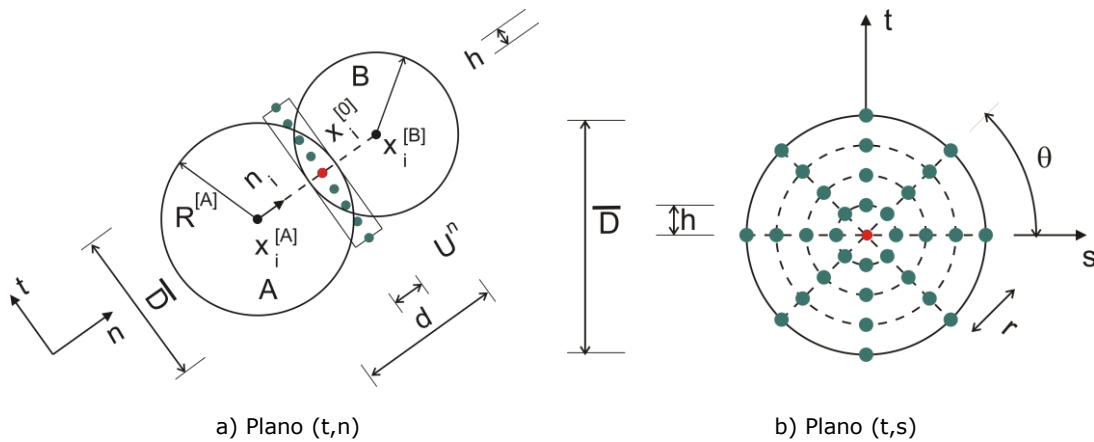


Figura 1 - Superfície de contacto para o modelo VMCG-3D

A sobreposição entre partículas no ponto de contacto de referência, U^n , e a sua localização, $x_i^{[0]}$, são obtidas através das seguintes expressões:

$$\begin{aligned} U^n &= R^{[A]} + R^{[B]} - d \\ x_i^{[0]} &= x_i^{[A]} + \left(R^{[A]} - \frac{1}{2} U^n \right) n_i \end{aligned} \quad [5]$$

em que: R é o raio das partículas.

No modelo de contacto VMCG-3D é necessário definir para cada ponto de contacto local, a localização do contacto e a sobreposição local do contacto. Por esta razão, são definidas coordenadas locais (t,s). Dada a discretização do contacto é necessário conhecer para cada ponto local, as coordenadas locais relativamente ao ponto de contacto de referência. Posteriormente, é definida a posição do ponto de contacto local em coordenadas locais:

$$x_i^{[j]} = x_i^{[0]} + s^{[j]} x_i^{[s]} + t^{[j]} x_i^{[t]} \quad [6]$$

em que: $x_i^{[s]}$ e $x_i^{[t]}$ são as coordenadas locais s e t , respetivamente, expressas em coordenadas globais, considerando $\bar{s} \times \bar{t} = \bar{n}$.

As forças de contacto que atuam em cada ponto de contacto local podem ser decompostas em componentes normal e de corte respetivamente ao plano de contacto:

$$F_i^{[j]} = F_i^{[n,j]} + F_i^{[s,j]} \quad [7]$$

A velocidade de contacto de um dado ponto de contacto local, ou seja a velocidade da partícula B relativamente à partícula A, na localização do contacto é dada por:

$$\begin{aligned}\dot{x}_i^J &= \left(\dot{x}_i^J \right)_B - \left(\dot{x}_i^J \right)_A \\ &= \left(\dot{x}_i^B + e_{ijk} \omega_j^B (x_k^J - x_k^B) \right) - \left(\dot{x}_i^{A1} + e_{ijk} \omega_j^A (x_k^J - x_k^A) \right)\end{aligned}\quad [8]$$

em que: e_{ijk} é o tensor de permutação. O vetor do incremento de deslocamento, nas componentes normal, $\Delta x^{J,N}$, e de corte, $\Delta x_i^{J,S}$, é dado por:

$$\begin{aligned}\Delta x^{J,N} &= \left(\dot{x}_i^J \Delta t \right) n_i \\ \Delta x_i^{J,S} &= \left(\dot{x}_i^J \Delta t \right) - \Delta x^{J,N} n_i\end{aligned}\quad [9]$$

A sobreposição do ponto de contacto local é definido incrementalmente para todos os pontos locais baseados na velocidade do contacto, no intervalo Δt :

$$U^{J,n} = U^{J,n,old} + \left(\dot{x}_i^J n_i \right) \Delta t \quad [10]$$

Dadas a rigidez normal e de corte do ponto de contacto local, a componente normal e de corte da força são obtidas incrementalmente através da lei da força-deslocamento linear:

$$\begin{aligned}\Delta F^{J,N} &= -k_n^J \Delta x^{J,N} \\ \Delta F_i^{J,S} &= -k_s^J \Delta x_i^{J,S}\end{aligned}\quad [11]$$

A atualização das componentes normal e tangencial da força no ponto de contacto local é efetuada de acordo com as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}F^{J,N,nova} &= F^{J,N,antiga} + \Delta F^{J,N} \\ F_i^{J,S,nova} &= F_i^{J,S,antiga} + \Delta F_i^{J,S}\end{aligned}\quad [12]$$

Atualizadas as forças, é aplicado o modelo constitutivo. Caso as forças obtidas não satisfaçam o modelo constitutivo é necessário realizar um ajustamento dependente do modelo considerado. A força resultante exercida sobre cada ponto local, F^J , é calculada através da seguinte expressão:

$$F^J = F^{J,N} n_i + F_i^{J,S} \quad [13]$$

A força, $F_i^{[C]}$, e o momento, $M_i^{[C]}$, que atuam sobre o ponto de contacto de referência, resultam da contribuição das forças exercidas sobre todos os pontos locais, podendo ser determinados através das seguintes expressões:

$$\begin{aligned}F_i^{[C]} &= \sum_j F_j^J \\ M_i^{[C]} &= - \sum_j e_{ijk} (x_j^J - x_j^0) F_k^J\end{aligned}\quad [14]$$

As forças e momentos atuantes no ponto de contacto de referência são transferidos para os centros de gravidade das partículas de acordo com as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}F_i^{[A]} &= F_i^{[A]} - F_i^{[C]} \\ F_i^{[B]} &= F_i^{[B]} + F_i^{[C]}\end{aligned}\quad [15]$$

$$\begin{aligned}M_i^{[A]} &= M_i^{[A]} - e_{ijk} (x_j^0 - x_j^A) F_k^{[C]} - M_i^{[C]} \\ M_i^{[B]} &= M_i^{[B]} + e_{ijk} (x_j^0 - x_j^B) F_k^{[C]} + M_i^{[C]}\end{aligned}\quad [16]$$

O modelo de contacto VMCG-3D permite também adotar o modelo tradicional de contacto pontual, MCP, admitindo apenas um único ponto de contacto. O aumento da densidade de pontos locais permite a convergência da resposta elástica para a resposta obtida através do modelo de contacto PB que assume uma distribuição uniforme dos pontos locais (Potyondy e Cundall, 2004).

2.2 - Estabilidade numérica

Caso se pretenda obter a solução estática, é possível recorrer a um algoritmo que permite escalar as massas, por forma a reduzir o número de passos necessários para obter a solução desejada. A massa e a inércia das partículas são escaladas artificialmente de modo a que o algoritmo baseado no método das diferenças centrais apresente uma maior taxa de convergência. Nesta comunicação a massa e a inércia das partículas são alteradas em cada passo de cálculo, de forma a garantir estabilidade do algoritmo para um incremento de tempo unitário, $\Delta t = 1$. A massa e a inércia normalizadas são determinadas através das seguintes expressões:

$$m^{\text{escalada}} = 0.25k_t; \quad I^{\text{escalada}} = 0.25k_\theta \quad [17]$$

Esta técnica resulta da aplicação do teorema de Gershgorin's (Underwood, 1983), que garante que a maior frequência do sistema estrutural é menor ou igual à razão entre os valores absolutos da rigidez e da massa. Através da aplicação do teorema de Gershgorin's à matriz de rigidez dos contactos locais VMCG-3D (Azevedo et al., 2008) obtêm-se os seguintes valores da rigidez de translação, k_t , e da rigidez rotacional, k_θ :

$$\begin{aligned} k_t &= \sum_{i=1}^N 2 \left(\sum_j k_n^j + \sum_j k_s^j \right) \\ k_\theta &= \sum_{i=1}^N \left(K_s d_{AC}^2 + K_s d_{AC} d_{BC} + 2 \bar{K}_s \bar{R}^2 + 2 \bar{K}_n \bar{R}^2 \right) \end{aligned} \quad [18]$$

em que: $d_{AC} = \|x_i^A - x_i^0\|$ e $d_{BC} = \|x_i^B - x_i^0\|$ representam a norma Euclidiana dos vetores correspondentes, $\sum_{i=1}^N$ indica o somatório ao longo dos "N" contactos associados a uma partícula, k_n^j e k_s^j são a rigidez normal e de corte, respetivamente, associada ao ponto local "j".

2.3 - Rigidez e resistência do contacto

O modelo de contacto VMCG-3D requer a definição dos parâmetros de deformabilidade do contacto, nomeadamente o módulo de Young do material contínuo equivalente, \bar{E} , e o fator que relaciona a rigidez de corte e normal do contacto, η . A rigidez total do contacto, nas direções normal e tangencial, é dada pelas seguintes expressões:

$$K_n = \sum_j k_n^j = \bar{E} \frac{A_c}{d} \quad [19]$$

$$K_s = \sum_j k_s^j = \eta K_n \quad [20]$$

em que: A_c é a área do contacto e d é a distância entre o centro de gravidade das partículas em contacto. A área do contacto é usualmente definida em função da média do raio das partículas ou do raio mínimo das partículas em interação. No presente trabalho, admite-se que a área do contacto é igual à área da faceta comum aos Voronois associados às partículas em contacto (Okabe et al., 1992; Herbst et al., 2008).

O modelo VMCG-3D requer também a definição das propriedades resistentes do material, nomeadamente a tensão máxima de tração do contacto, $\sigma_{n,t}$, a tensão máxima de coesão do contacto, τ , e o termo de atrito do contacto, μ_c . Para a relação constitutiva do contacto, adotou-se um modelo frágil, assumindo o critério de rotura de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite. A força de contacto na direção normal segue uma lei força-deslocamento linear, Figura 2 (a), sendo a força de tração limitada pela resistência à tração do contacto:

$$F_{n,\text{max}} = \sigma_{n,t} A_c \quad [21]$$

Na direção tangencial, Figura 2 (b), a força máxima admissível é caracterizada pela força normal, F_n , pelo coeficiente de atrito, μ_c , e pela coesão máxima, C_{max} , através da seguinte expressão:

$$F_{s,\text{max}} = \tau A_c + F_n \mu_c = C_{\text{max}} + F_n \mu_c \quad [22]$$

Caso a força de corte exercida sobre o contacto exceda a força de corte máxima, o contacto deixa de apresentar coesão, passando a interação entre partículas a ser efetuada por atrito puro, sendo apenas possível a transmissão de forças no contacto sob compressão. O mesmo ocorre caso o contacto seja solicitado por uma força de tração superior à força máxima admitida para a direção normal.

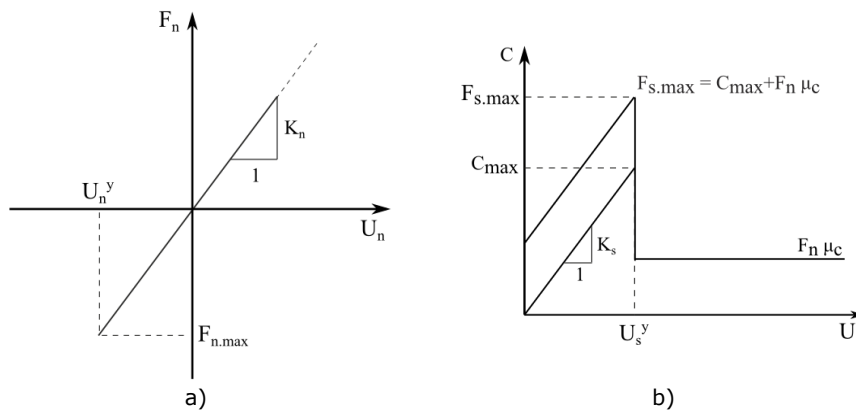


Figura 2 - Modelo constitutivo de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite: a) direção normal e b) tangencial

A resistência e a rigidez de cada ponto local, adotado na discretização do contacto, são definidas através do peso do ponto do contacto local e do número de pontos locais. Neste trabalho, admite-se 2/3 do peso para o ponto central do contacto e distribui-se 1/3 do peso pelos restantes pontos locais adotados.

2.4 - Geração do sistema de partículas

Inicialmente as partículas são introduzidas com metade do seu raio para evitar a sobreposição entre elementos. Depois de inseridas, as partículas retomam o seu raio real. Em seguida aplica-se o algoritmo de solução do MP conduzindo a um rearranjo das partículas. Nesta fase do procedimento de geração adota-se o modelo de contacto tradicional, MCP, seguindo a formulação do deslocamento total na direção normal.

Numa segunda fase os centros de gravidade das partículas são triangularizados com base no algoritmo de Delaunay (Okabe et al., 1992; Herbst et al., 2008). Em seguida o diagrama de Voronoi de Laguerre associado é construído a partir da estrutura de tetraedros de Delaunay. Nesta comunicação considera-se que duas partículas interagem com base num contato do tipo VMCG-3D no caso dos Voronoi associados partilharem uma faceta. As áreas de contacto são dadas em função da área da faceta comum aos Voronoi, sendo adotada de modo simplificado uma superfície circular equivalente para o contacto.

Na Figura 3 apresenta-se um sistema de partículas equivalente em 2D, em que se apresenta a interação entre partículas, através da adoção do esquema referido, Figura 3 a), e apresentam-se o aspeto final dos contactos semelhante a um sistema de partículas poliédrico, Figura 3 b).

É de referir que o número de contactos obtidos através de um critério de interação baseado na estrutura de Voronoi é muito superior ao número de contactos que usualmente se obtém em modelos mais tradicionais, em que apenas são admitidas as interações reais entre partículas, Potyondy e Cundall (2004). O aumento do número de contactos entre as partículas é favorável ao aumento do ângulo de atrito interno macroscópico em ensaios triaxiais (Wang e Tonon, 2009; Azevedo e Lemos, 2013).

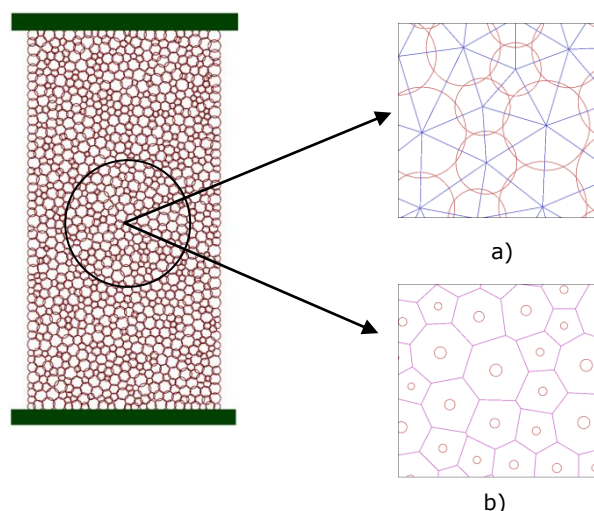


Figura 3 - Estrutura granular de um sistema de partículas equivalente em 2D: a) Ligação entre partículas b) Altura e localização dos contactos

Os parâmetros do esquema de geração de partículas são o diâmetro máximo, D_{max} , diâmetro mínimo, D_{min} , a distribuição do raio das partículas, a porosidade, η_p , e a densidade das partículas, ρ .

2.5 - Parâmetros do modelo

O modelo VMCG-3D requer a definição de parâmetros físicos associados aos contactos e às partículas. Os parâmetros associados aos contactos correspondem a parâmetros elásticos e resistentes. A resposta elástica está relacionada com o módulo de Young do material contínuo equivalente, \bar{E} , e com o fator que relaciona a rigidez de corte e a rigidez normal, η . A resposta resistente macroscópica do material requer a definição da resistência à tração, $\sigma_{n,t}$, à coesão, τ , e do coeficiente de atrito do contacto, μ_c .

Os parâmetros associados ao sistema de partículas correspondem ao diâmetro máximo, D_{max} , e diâmetro mínimo, D_{min} , à sua distribuição e à porosidade inicial do sistema de partículas adotado. É de salientar que a distribuição da dimensão adotada para as partículas deverá ser o mais próxima possível da constituição granular da rocha que se pretende modelar.

A discretização do contacto, nomeadamente o número de camadas e o número total de contactos são também parâmetros do modelo VMCG-3D. Quanto maior a densidade de contactos mais precisa é a resposta elástica do modelo, aproximando-se da resposta obtida através do modelo de contacto PB, baseado numa distribuição uniforme de contactos locais (Potyondy e Cundall, 2004). No entanto, um maior número de contactos implica uma maior exigência computacional. Deste modo, é importante definir o menor número de pontos locais que corresponde uma resposta satisfatória com uma semelhante precisão.

Nos modelos MP as micropropriedades são definidas de forma a reproduzir o comportamento do material a nível macroscópico. Como consequência da dificuldade em estabelecer uma relação direta entre as propriedades do modelo e as propriedades do material a simular, o processo de calibração é um processo relativamente moroso.

3 - ENSAIOS TRIAXIAIS E DO TIPO BRASILEIRO

3.1 - Introdução

O modelo de contacto VMCG-3D é validado, para a rocha granítica ocelar, mediante a simulação numérica de ensaios triaxiais e do tipo Brasileiro e da comparação dos resultados numéricos obtidos com os resultados numéricos e experimentais conhecidos, nomeadamente o estudo de Kazerani e Zhao (2010) e Kazerani (2011).

Os ensaios triaxiais foram realizados em amostras com a forma de paralelepípedo com 80 mm de largura, 160 mm de altura e 80 mm de espessura, os ensaios do tipo Brasileiro foram realizados em amostras cilíndricas com 80 mm de diâmetro e 40 mm de espessura, Figura 4.

Em ambos os ensaios, o sistema de partículas é gerado com base no esquema definido em 2.5. Devido a limitações computacionais, são admitidas partículas esféricas com diâmetro compreendido entre 4 a 6 mm, por forma a simular o granito ocelar, que apresenta uma granulometria entre 2 a 6 mm (Kazerani, 2011). Os ensaios triaxiais apresentam cerca de 10170 partículas em média e os ensaios do tipo Brasileiro cerca de 1658 partículas em média.

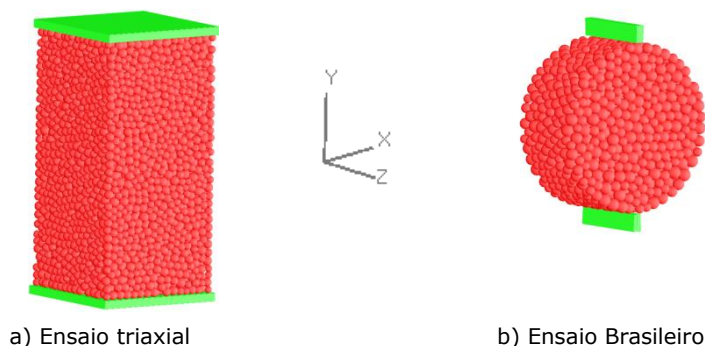


Figura 4 - Modelo de elementos discretos VMCG-3D, para a simulação de ensaios: a) Ensaio triaxial e b) Ensaio Brasileiro

Nos ensaios triaxiais, as fronteiras laterais são simuladas de modo a reproduzir o comportamento de uma membrana flexível. Para tal, as paredes são divididas em vários elementos poliédricos, Figura 5, que não interagem entre si, em que apenas são permitidos deslocamentos na direção normal. A tensão de confinamento é aplicada diretamente à superfície interior da parede e transmitida para as partículas que

se encontram na fronteira através de um modelo de contacto pontual. Os elementos poliédricos são controlados pela tensão de confinamento e os contactos partícula-parede apresentam a rigidez de contacto reduzida, sendo adotada apenas 10 % da rigidez dos contactos inter-partículas.

Nos ensaios triaxiais, depois de aplicada a tensão isotrópica inicial, aplica-se uma velocidade vertical à placa superior de 0.25×10^{-8} m/s. Nos ensaios do tipo Brasileiro aplica-se uma velocidade de 0.25×10^{-8} m/s à placa superior. Em ambas as simulações, adota-se uma taxa de deformação baixa, e um coeficiente de amortecimento local elevado, de 0.70, por forma a garantir as condições quase-estáticas. As paredes laterais e as placas horizontais apenas transmitem forças na direção normal às partículas.

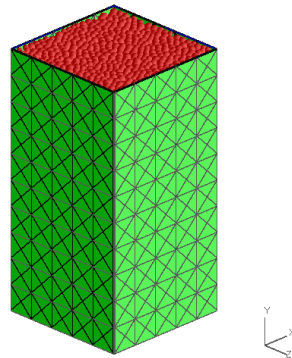


Figura 5 - Confinamento da parede com elementos poliédricos

3.2 - Estudo paramétrico

No presente estudo paramétrico, apresenta-se o estudo da influência dos parâmetros microscópicos elásticos, \bar{E} , η , e do coeficiente de atrito do contacto, μ_c , na resposta macroscópica da rocha granítica ocelar.

Para a discretização do contacto assume-se um ponto central mais uma camada periférica com quatro pontos locais. Esta discretização permite representar uma adequada resistência à tração e rigidez rotacional do contacto, com uma menor exigência computacional e com um desempenho próximo de modelos com uma maior discretização do contacto (Azevedo e Lemos, 2013).

3.2.1 - Deformabilidade

Os parâmetros macroscópicos elásticos são determinados através da realização de ensaios de compressão uniaxial, adotando diferentes valores do módulo de Young equivalente, $0.5\bar{E}_R$, \bar{E}_R e $2\bar{E}_R$, admitindo $\bar{E}_R = 44.5$ GPa, e diferentes relações entre a rigidez de corte e a rigidez normal. O valor adotado de \bar{E}_R é o que corresponde à melhor aproximação aos valores macroscópicos elásticos do granito ocelar.

O módulo de Young, E , é influenciado por ambos os parâmetros microscópicos, tal como verificado por Wang e Tonon (2009), sendo mais sensível à variação da relação K_s/K_n para valores de \bar{E} mais elevados, Figura 6 a). O coeficiente de Poisson, ν , é somente condicionado pela relação K_s/K_n , Figura 6 b), tal como verificado por Diederichs (2000), Potyondy e Cundall (2004) e Wang e Tonon (2009). Admitindo que os sistemas de partículas com o mesmo valor de \bar{E} apresentam a mesma rigidez de contacto na direção normal conclui-se que uma menor rigidez ao corte conduz a uma maior deformação lateral.

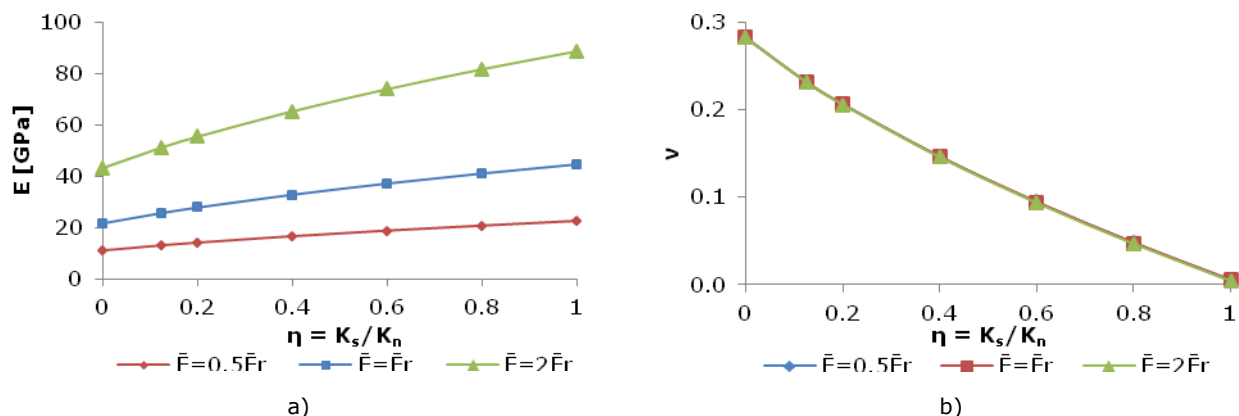


Figura 6 - Influência dos parâmetros de deformabilidade nas propriedades elásticas do material: a) Módulo de Elasticidade; b) Coeficiente de Poisson

O valor de \bar{E} igual a 44.5 GPa e o de η igual a 0.125, conduzem a valores macroscópicos do módulo de elasticidade de 25.8 GPa e do coeficiente de Poisson de 0.23, característicos do granito ocelar.

3.2.2 - Influência do coeficiente de atrito

Para analisar a influência do coeficiente de atrito do contacto, μ_c , na resistência do material sintético executaram-se ensaios triaxiais e do tipo Brasileiro, para os modelos VMCG-3D 0.2 e VMCG-3D 0.4, com o coeficiente de atrito de 0.2 e 0.4, respetivamente. Admitindo para os contactos, os parâmetros microscópicos indicados no Quadro 1.

Quadro 1 - Parâmetros microscópicos adotados no modelo VMCG-3D

\bar{E} [GPa]	η	$\sigma_{n,t}$ [MPa]	τ [MPa]	μ_c
44.5	0.125	18	99	0.2 e 0.4

As propriedades resistentes obtidas para os modelos VMCG-3D 0.2 e VMCG-3D 0.4 são apresentadas no Quadro 2, nomeadamente a resistência à compressão, σ_c , a coesão, c , o ângulo de atrito interno, ϕ , a resistência à tração direta, $\sigma_{t,dir}$, e a resistência à tração indireta, $\sigma_{t,ind}$.

Da análise dos resultados, conclui-se que o aumento do coeficiente de atrito entre as partículas conduz à redução da coesão macroscópica e ao acréscimo do ângulo de atrito, com conseqüente aumento da resistência à compressão. A resistência à tração do material é pouco influenciada por esta micropropriedade. Note-se que o efeito do coeficiente de atrito do contacto tem significado apenas para modelos com um elevado número de contactos por partícula. Em modelos com um baixo número de contactos por partícula (Potyondy e Cundall, 2004) o efeito do coeficiente de atrito é reduzido.

O modelo VMCG-3D 0.4 permite simular adequadamente a resistência à compressão e à tração direta do material sintético, apresentando razões $\sigma_c/\sigma_{t,dir}$ muito próximas da característica do granito ocelar. No entanto, o presente modelo não permite simular a resistência à tração indireta, obtendo-se valores de resistência à tração de sensivelmente metade dos obtidos com os ensaios de tração direta. Em ensaios em rochas de natureza similar é usual obter valores de tração indireta ligeiramente superiores aos valores de tração direta (Erarslan e Williams, 2012).

Na Figura 7 apresentam-se envolventes de rotura experimentais e numéricas obtidas para o granito ocelar (Kazerani e Zhao, 2010), o critério de rotura de Hoek-Brown aplicados aos dados experimentais obtidos para o granito ocelar, e os resultados obtidos da aplicação dos modelos VMCG-3D 0.2 e VMCG-3D 0.4. Comparando as envolventes de rotura obtidas, verifica-se que o modelo VMCG-3D permite a representação da envolvente de rotura semelhante à real, aproximando-se dos resultados experimentais obtidos por Kazerani e Zhao (2010). Verifica-se ainda que o aumento do coeficiente de atrito do contacto conduz a um maior declive da envolvente de rotura.

Quadro 2 - Resultados do modelo VMCG-3D 0.2, VMCG-3D 0.4 e as propriedades do granito ocelar

	σ_c [MPa]	c [MPa]	ϕ [°]	$\sigma_{t,dir}$ [MPa]	$\sigma_{t,ind}$ [MPa]	$\sigma_c/\sigma_{t,dir}$	$\sigma_c/\sigma_{t,ind}$
VMCG-3D 0.2	111.56	19.33	51.78	-9.04	-4.68	12.35	23.83
VMCG-3D 0.4	118.89	18.90	54.73	-8.89	-4.78	13.38	24.87
Granito ocelar (Kazerani e Zhao, 2010)	122.10	21.00	53.00	-	-8.80	-	13.88

Na Figura 8 apresentam-se as curvas de tensão-deformação axial obtidas para o modelo VMCG-3D 0.2 e VMCG-3D 0.4. Verifica-se que o aumento da tensão de confinamento traduz-se num aumento dos valores de deformação axial e de tensão axial para os quais se atinge a rotura do material. É de notar que ambos os modelos apresentam um comportamento extremamente frágil, verificando-se um ponto de inflexão na inclinação das curvas tensão-deformação, em especial para valores de confinamento mais baixos. No modelo VMCG-3D 0.4 este aspeto não é tão evidente para tensões de confinamento superiores (6 MPa, 9 MPa, 12 MPa), para as quais o material apresenta maior ductilidade.

Da comparação das curvas tensão-deformação obtidas, conclui-se que o aumento da tensão de confinamento e o aumento do coeficiente de atrito do contacto conduz a uma resposta macroscópica mais dúctil.

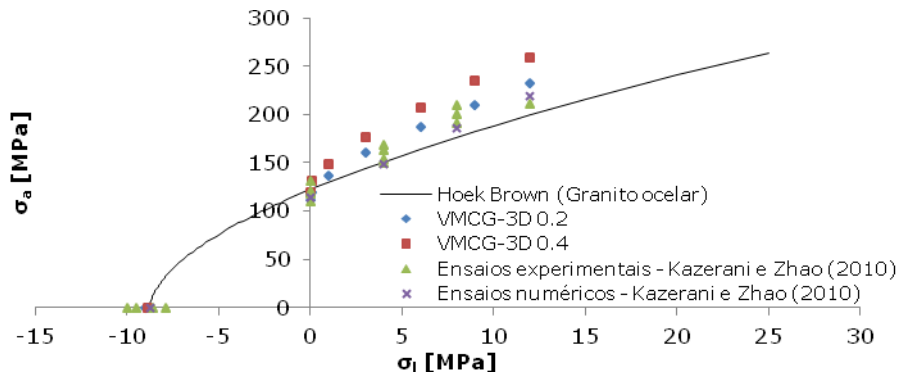


Figura 7 - Envolvente de rotura: Critério de rotura de Hoek-Brown para o granito ocelar, modelo VMCG-3D 0.2, modelo VMCG-3D 0.4, ensaios experimentais e numéricos de Kazerani e Zhao (2010)

Os padrões de fratura obtidos através do modelo VMCG-3D 0.4 para o ensaio de compressão simples, à tração direta, triaxial com uma tensão de confinamento de 6 MPa e à tração indireta (do tipo Brasileiro), são apresentados na Figura 9. Verifica-se que os padrões de fratura obtidos nos diferentes ensaios encontram-se de acordo com o expectável. No ensaio de compressão simples, sem atrito entre as placas horizontais e o sistema de partículas, desenvolvem-se fendas paralelas à direção da carga, Figura 9 a). Enquanto no ensaio triaxial com a tensão de confinamento de 6 MPa, Figura 9 c), devido ao aumento da tensão de confinamento, verifica-se o desenvolvimento de superfícies de rotura com alguma inclinação. Conforme esperado, no ensaio à tração direta a superfície de rotura desenvolve-se perpendicularmente à direção da carga, Figura 9 b), e no ensaio de tração indireta a superfície de rotura é paralela à carga, Figura 9 d).

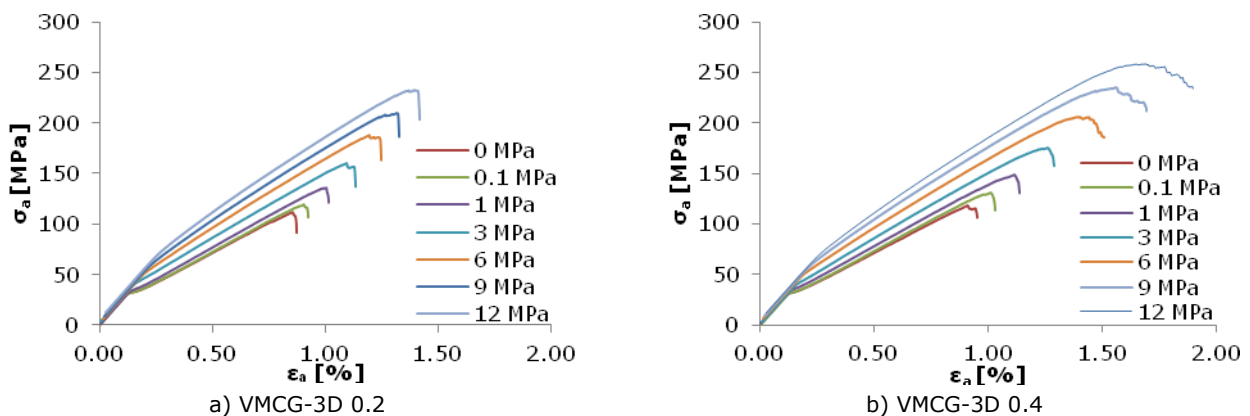


Figura 8 - Curvas tensão-deformação do modelo VMCG-3D: ensaios triaxiais com diferentes tensões de confinamento

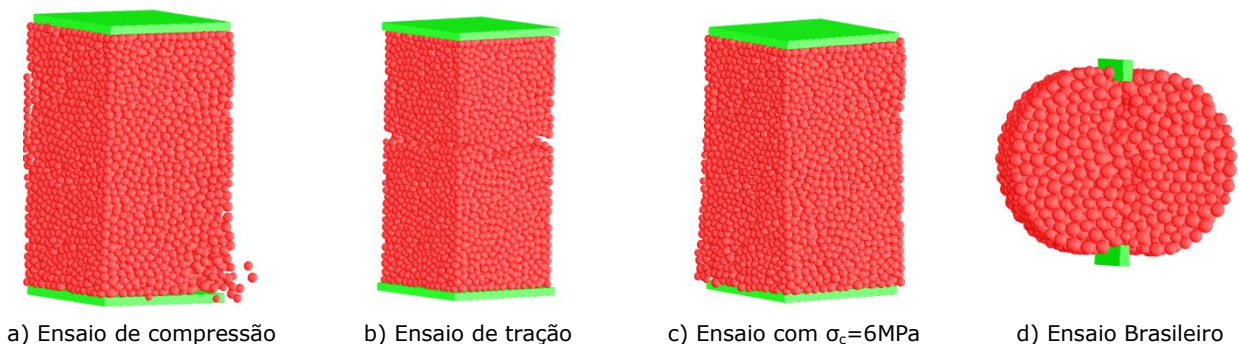


Figura 9 - Padrões de fratura obtidos no modelo VMCG-3D 0.4

Na Figura 10 representa-se, a evolução da tensão de compressão axial em função da extensão axial e lateral para os modelos estudados, VMCG-3D 0.2 e VMCG-3D 0.4, bem como para o ensaio experimental (Kazerani, 2011). Os modelos VMCG-3D conseguem simular, numa fase inicial do ensaio de compressão simples, a inclinação desejável da curva tensão-deformação para a rocha granítica ocelar, aproximando-se razoavelmente do comportamento obtido no ensaio experimental de Kazerani (2011). No entanto, dado o carácter extremamente frágil do modelo numérico, fendilhação muito acentuada para valores de tensão axial reduzidos, Figura 11, obtém-se um ponto de inflexão verificado na curva tensão-deformação, afastando-se o comportamento do observado experimentalmente. Em modelos 2D

equivalentes não se obtém este ponto de inflexão (Azevedo e Gouveia, 2013).

A evolução da tensão uniaxial e da percentagem das fendas à tração e ao corte em função da deformação lateral, durante o ensaio de compressão simples, o ensaio triaxial com a tensão de confinamento de 0.1 MPa e de 12 MPa, são representadas nas Figuras 11, 13 e 15, respetivamente. Verifica-se que a rotura deve-se inicialmente ao desenvolvimento de fendas à tração, enquanto as fendas ao corte surgem para valores de deformação superiores, para controlar a abertura e a coalescência das fendas associadas ao dano dos contactos à tração. Nota-se ainda que, o aumento da tensão de confinamento do material conduz ao aumento da resistência do mesmo e consecutivamente à diminuição das fendas à tração e ao acréscimo das fendas ao corte, Figura 15.

Nas Figuras 12, 14 e 16 representa-se a deformação volumétrica e a deformação volumétrica associada à abertura das fendas em função da deformação axial obtida durante o ensaio de compressão simples, o ensaio triaxial com a tensão de confinamento de 0.1 MPa e de 12 MPa, respetivamente. A deformação volumétrica associada à abertura das fendas, ϵ_{v_fendas} , obtém-se através da subtração da deformação volumétrica elástica, $\epsilon_{v,el}$, à deformação volumétrica medida numericamente, ϵ_v . A deformação axial, ϵ_a , e a deformação lateral, ϵ_l , são medidas na zona central do provete. Conforme esperado, verifica-se que o aumento da tensão de confinamento resulta num aumento da deformação volumétrica associada à abertura das fendas. Da comparação com os resultados experimentais, Figura 12, verifica-se ainda que a resposta numérica obtida é extremamente frágil dado os valores de deformação volumétrica registados serem extremamente elevados.

Dos resultados obtidos verifica-se que o modelo VMCG-3D permite simular corretamente os resultados experimentais obtidos em rocha, nomeadamente, a relação entre a resistência à compressão e à tração uniaxial, bem como o ângulo de atrito macroscópico obtido com base em ensaios triaxiais. Verifica-se ainda que o modelo VMCG-3D apresenta um comportamento extremamente frágil e não permite simular corretamente a relação entre a resistência à tração indireta a resistência à tração direta observada em rocha. Deste modo verifica-se a necessidade de implementar modelos com leis constitutivas com enfraquecimento ou ter em conta de forma direta uma maior heterogeneidade da rocha a simular. Num modelo 2D equivalente (Azevedo e Gouveia, 2013), a incorporação de uma lei de enfraquecimento possibilitou a obtenção de uma relação entre a tensão direta e indireta próxima da observada em rocha.

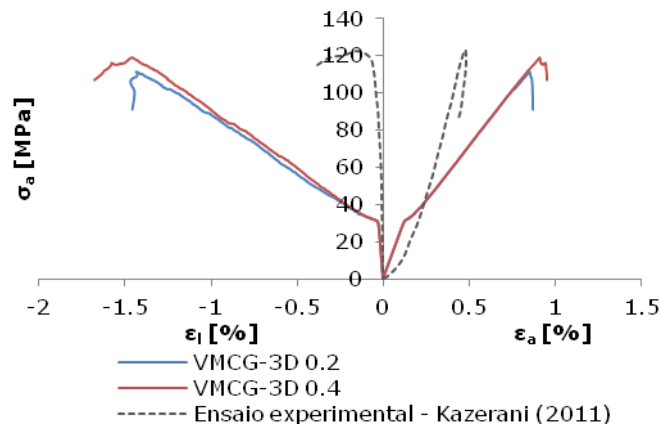


Figura 10 - Curvas tensão-deformação em ensaios de compressão simples: VMCG-3D 0.2, VMCG-3D 0.4 e ensaio experimental (Kazerani, 2011)

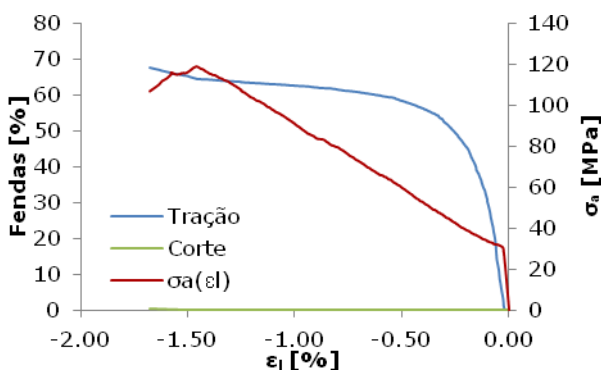


Figura 11 - Evolução de σ_a , fendas à tração e ao corte em função de ϵ_l , Modelo VMCG-3D 0.4: Ensaio de compressão

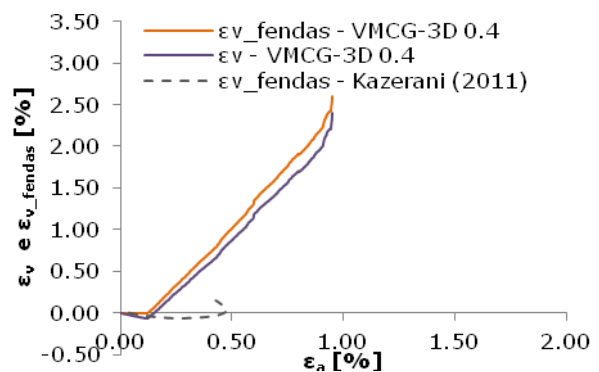


Figura 12 - Evolução de ϵ_v e ϵ_{v_fendas} em função de ϵ_a , Modelo VMCG-3D 0.4 e ensaio experimental (Kazerani, 2011): Ensaio de compressão

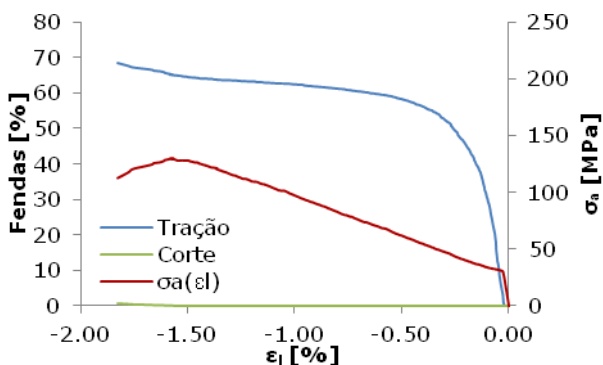


Figura 13 - Evolução de σ_a , fendas à tração e ao corte em função de ϵ_1 , Modelo VMCG-3D 0.4: Ensaio triaxial com $\sigma_c = 0.1$ MPa

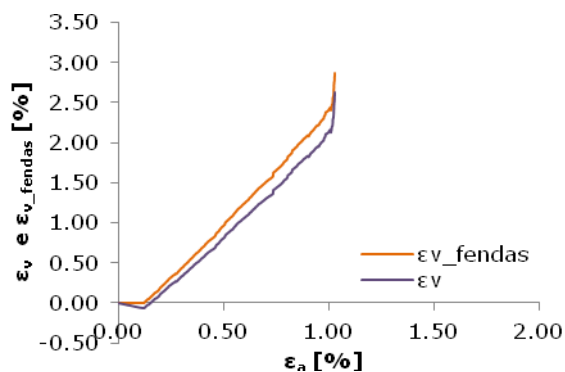


Figura 14 - Evolução de ϵ_v e ϵ_{v_fendas} em função de ϵ_a , Modelo VMCG-3D 0.4: Ensaio triaxial com $\sigma_c = 0.1$ MPa

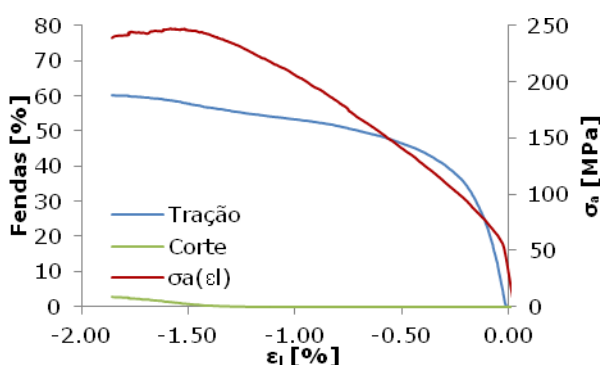


Figura 15 - Evolução de σ_a , fendas à tração e ao corte em função de ϵ_1 , Modelo VMCG-3D 0.4: Ensaio triaxial com $\sigma_c = 12$ MPa

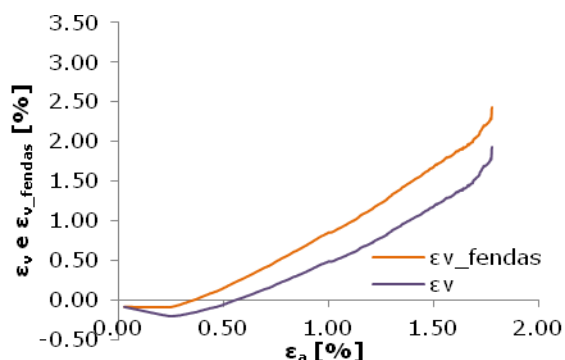


Figura 16 - Evolução de ϵ_v e ϵ_{v_fendas} em função de ϵ_a , Modelo VMCG-3D 0.4: Ensaio triaxial com $\sigma_c = 12$ MPa

4 - CONCLUSÕES

Apresenta-se um modelo de contacto 3D generalizado, VMCG-3D, que admite uma discretização dos contactos baseada em múltiplos contactos locais. A altura e a localização dos contactos são definidas com base na estrutura de Voronoi de Laguerre dos centros de gravidade das partículas. Considera-se que duas partículas interagem com base num contacto do tipo VMCG-3D no caso de os Voronoi associados partilharem uma faceta. Com este critério de interação, cada partícula apresenta um número muito maior de contactos quando comparado com modelos mais tradicionais, MPC. O modelo utilizado é constituído por partículas esféricas, contudo a interação entre elementos é executada através de interfaces poliédricas aproximadas por superfícies circulares de área equivalente.

O modelo MP VMCG-3D, desenvolvido para o estudo do comportamento não-linear da rocha, permite reproduzir de forma explícita o processo de propagação de fendas e a evolução da capacidade resistente do material em função da tensão de confinamento. O modelo MP apresentado constitui uma abordagem alternativa dos processos elementares de rotura, no qual a resposta macroscópica complexa aparece em função de interações simples entre partículas.

Mostra-se que é possível calibrar as micropropriedades elásticas do modelo de partículas desenvolvido de modo a obter uma resposta macroscópica próxima da observada experimentalmente. Os parâmetros de deformabilidade do modelo podem ser obtidos ajustando em primeiro lugar o fator que relaciona a rigidez de corte e a rigidez normal ao coeficiente de Poisson do material. De seguida dever-se-á ajustar o valor do módulo de elasticidade do material contínuo equivalente de forma a reproduzir o valor pretendido do módulo de elasticidade do material.

Verifica-se uma razoável correlação com o observado experimentalmente entre os valores da resistência à compressão e à tração direta e a envolvente de rotura. Do estudo da influência do coeficiente de atrito, demonstra-se que a resistência à compressão do material é sensível à variação do coeficiente de atrito do contacto. No entanto, existem algumas limitações, nomeadamente na calibração da relação entre a resistência à tração direta e a resistência à tração indireta e a resposta obtida ser muito frágil para confinamentos reduzidos, obtendo-se um claro ponto de inflexão na relação entre a tensão axial e a deformação axial.

Assim, é ainda necessário continuar a realizar investigação na área da mecânica de fratura em rocha com modelos MP, nomeadamente através de desenvolvimento de esquemas de geração que permitam uma representação mais próxima da real e incorporando modelos constitutivos mais complexos, nomeadamente leis de enfraquecimento.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto de investigação PTDC/ECM/114492/2009, financiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia.

REFERÊNCIAS

- Azevedo, N. (2003). A rigid particle discrete element model for the fracture analysis of plane and reinforced concrete. Ph.D Thesis. Heriot-Watt University, Scotland.
- Azevedo, N. e Lemos, J. (2013). A 3d generalized rigid particle contact model for rock fracture. *International Journal for Computer - Aided Engineering and Software* 30(2):277-300.
- Azevedo, N. e Gouveia, F. (2013). Um modelo discreto de partículas 2D para simulação da fratura em rocha: Formulação e Calibração. *Geotecnia* 29:73-101.
- Azevedo, N. e Lemos, J.V. (2005). A generalized rigid particle contact model for fracture analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 29, pp. 269-285.
- Azevedo, N., Lemos, J. e Almeida J. (2008). A 3D generalized rigid particle contact model for fracture analysis. *Proceedings of the 12th International Association for Computer Methods and Advances in Geomechanics*, Goa, pp 1-10.
- Cho, N., Martin, C.D. e Segol, D.C. (2007). A clumped particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Vol. 44, pp. 997-1010.
- Diederichs M (2000). Instability of hard rock masses: the role of tensile damage and relaxation. Ph.D Thesis. University of Waterloo.
- Erarslan N. e Williams, D. (2012). Experimental, numerical and analytical studies on tensile strength of rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Vol. 49, pp. 21-30.
- Hentz, S., Daudeville, L. e Donze, V. (2004). Identification and Validation of a discrete element model for concrete. *Journal of Engineering Mechanics ASCE*, 130 (6), pp. 709-719.
- Herbst, M., Konietzky, H. e Walter K. (2008). 3D microstructural modeling. *Proceedings of Continuum and Distinct Element Numerical Modeling in Geo-Engineering*, Editors Hart, Detournay & Cundall.
- Itasca Consulting Group, Inc., (2004), UDEC Universal Distinct Element Code, Version 4.0, Minneapolis, ICG.
- Kazerani T (2011) Micromechanical study of rock fracture and fragmentation under dynamic loads using discrete element method. PH.D Thesis. Lausanne, Switzerland.
- Kazerani, T. e Zhao, J. (2010). Micromechanical parameters in bonded particle method for modelling of brittle material failure. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* Vol. 34 (18), pp. 1877-1895.
- Lan, H., Martin, C.D. e Hu, B. (2010). Effect of Heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behaviour during compression loading. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 115, pp. 1-14.
- Lilliu, J.G. e Van Mier, M. (2003). 3D lattice type fracture model for concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 70 (7-8), pp. 841-927.
- Meguro, K. e Hakuno, M. (1989). Fracture analysis of concrete structures by the modified distinct element method. *Structural Engineering / Earthquake Engineering*, 6 (2), pp. 83-294.
- Okabe, A., Boots, B. e Sugihara, K. (1992). Spatial tessellations. Concepts and Applications of Voronoi Diagrams. John Wiley & Sons.
- Potyondy, D. (2010). A grain based model for rock: approaching the true microstructure. C.C. Li, et al Eds, in *Bergmekanikk i Norden 2010 - Rock Mechanics in the Nordic Countries*, Konsberg: Norwegian group for rock mechanics, pp. 225-234.
- Potyondy, D. e Cundal, P. A. (1996), Modeling rock using bonded assemblies of circular particles. Aubertin, Hassani, Mitri eds., 2nd North American Rock Mechanics Symposium, Balkema, pp. 1937-1944.

- Potyondy, D. e Cundall, P. A. (2004), A bonded-particle model for rock. *Int J Rock Mech Min Sci*, 41, pp. 1329-1364.
- Schlangen, E. e Garboczi, E. (1997). Fracture simulations of concrete using lattice models: Computational aspects. *Engineering Fracture Mechanics*, 57 (2/3), pp. 319-332.
- Underwood, P. (1983). Dynamic relaxation. T. Belytschko and T. Hughes eds. *Computation Methods for Transient Analysis*, New York, North-Holland, pp. 246-265.
- Wang, Y. e Tonon, F. (2009). Modeling Lac du Bonnet granite using a discrete element model. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, Vol. 46, pp. 1124-1135.