

MODELO DE PARTÍCULAS 3D PARA O ESTUDO DA FRATURA EM ROCHA COM BASE EM DIAGRAMAS DE VORONOI DA ESTRUTURA GRANULAR

A 3D particle model for rock fracture based on the Voronoi diagrams of the granular structure

Mariline Candeias*

Nuno Monteiro Azevedo**

Maria Luísa Braga Farinha***

RESUMO – Os modelos de partículas, ao terem em conta a estrutura granular da rocha, consideram de forma explícita a variabilidade associada ao material, razão pela qual têm sido aplicados com sucesso no estudo da fratura em rocha. Neste trabalho é apresentado um modelo de partículas 3D com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi da estrutura granular, que permite ter em conta de forma aproximada uma geometria do tipo poliédrica mantendo a simplicidade e o reduzido esforço computacional característico dos modelos de partículas esféricas. Propõe-se então um modelo de contacto múltiplo no qual a superfície de contacto é definida com base nas facetas dos diagramas de Voronoi. O modelo de partículas é validado com base em ensaios experimentais em rocha (triaxiais, uniaxiais e ensaio Brasileiro). Apresentam-se vários estudos paramétricos que evidenciam a influência dos parâmetros do modelo de partículas nas propriedades macroscópicas elásticas e resistentes obtidas numericamente. É ainda analisada a relevância de um modelo de contacto com leis de enfraquecimento bilinear em tração e corte que conduz a valores coerentes de tração última em ensaios de tração diretos e em ensaios Brasileiros.

SYNOPSIS – Particle models, by taking into account the material grain structure, explicitly consider the material randomness and have been successfully applied to rock fracture studies. In this work a 3D particle model based on the Laguerre-Voronoi diagrams of the grain structure is presented. The proposed model takes into account the effect of the polyhedral shape but still keeps the simplicity and the reduced computational costs associated with spherical particle models. A multiple contact model is presented in which the contact surface is based on the common facet of the associated particle Laguerre-Voronoi diagrams. The particle model is validated against known experimental data on a granite rock (triaxial, uniaxial and Brazilian tests). Several parametric studies are presented showing the influence of the elastic and strength particle parameters on both the macroscopic elastic and strength properties. A reference is also made to the relevance of adopting a bilinear tensile/shear softening contact model in order to obtain coherent ultimate tensile values in direct tensile tests and in Brazilian tests.

Palavras Chave – Modelo 3D de partículas, Fratura em rocha, Diagramas de Laguerre-Voronoi.

Keywords – 3D particle model, Rock fracture, Laguerre-Voronoi diagrams.

* Bolseira de Investigação, Departamento de Barragens de Betão, LNEC. orcid.org/0000-0003-1314-1032
E-mail: marilinecandeias@gmail.com

** Investigador Auxiliar, Departamento de Barragens de Betão, LNEC. orcid.org/0000-0001-8838-3760
E-mail: nazevedo@lneec.pt

*** Investigadora Auxiliar, Departamento de Barragens de Betão, LNEC. orcid.org/0000-0002-5375-8283
E-mail: lbraga@lneec.pt

1 – INTRODUÇÃO

Os modelos de partículas (MP), ao terem em conta a estrutura granular e a aleatoriedade associada, permitem reproduzir, com base em leis de interação simples, padrões de fendilhação e comportamentos macroscópicos semelhantes aos observados em ensaios laboratoriais em materiais quase-frágeis. Assim, desde o final do século XX os modelos MP, inicialmente em duas dimensões, têm sido aplicados no estudo da fratura no betão, rocha e em misturas betuminosas (Meguro *et al.*, 1991; Potyondy *et al.*, 1996; Chang e Meegoda, 1997; Schlengen e Garboczi, 1997; Bolander e Saito, 1998).

Os modelos MP são conceptualmente mais simples do que os modelos baseados numa abordagem contínua e o desenvolvimento de superfícies de rotura ocorre de forma natural dada a sua natureza discreta. Apresentam no entanto algumas desvantagens, nomeadamente um maior custo computacional, dado o grau de discretização necessário, e o facto de exigirem um processo intermédio de calibração dos parâmetros do modelo, dada a dificuldade em definir estes parâmetros de forma direta a partir de resultados experimentais.

Em estudos de fratura em rocha o modelo de base discreta do tipo MP proposto por Potyondy e Cundall (2004) é um dos modelos de partículas com maior aceitação, dado o seu carácter pioneiro e o facto de o modelo conseguir reproduzir a complexa resposta da rocha em compressão simples. No entanto, é reconhecido que o referido modelo MP apresenta algumas limitações, como, por exemplo, não simula de forma correta a relação conhecida entre a resistência à compressão e a tração uniaxial, e o ângulo de atrito interno macroscópico obtido com base em ensaios triaxiais em rochas duras é inferior ao valor obtido experimentalmente.

De modo a melhorar o desempenho dos modelos MP, Wang e Tonon (2009) propuseram um modelo MP de partículas esféricas que permite modelar a envolvente de rotura triaxial de uma rocha granítica. Este melhor desempenho, quando comparado com a resposta do modelo MP inicialmente proposto por Potyondy e Cundall (2004), está associado ao acréscimo do número de contactos por partícula e à inclusão de um parâmetro de atrito na resistência ao corte do contacto. No entanto, o modelo MP de Wang e Tonon (2009) não consegue reproduzir a relação entre a resistência à compressão e a resistência à tração uniaxial obtida experimentalmente. Em Azevedo e Lemos (2013) é proposto um modelo de contacto 3D que permite a transmissão de momento na interface de contacto, sendo os contactos definidos com base nas arestas dos tetraedros da malha de Delaunay da estrutura granular. É demonstrado que o modelo proposto consegue prever não só a envolvente de rotura, mas também a razão obtida experimentalmente entre os valores da tensão de compressão simples e da tensão de tração indirecta. Em Scholtès e Donzé (2013) é introduzido um parâmetro de interacção que controla o número de contactos a adotar entre partículas, demonstrando-se igualmente que um aumento deste número origina um aumento do quociente tensão de tração indirecta/tensão de compressão simples obtido numericamente.

Modelos MP 3D de geometria poliédrica mais próxima da geometria real da estrutura granular observada em rocha, com comportamento rígido ou incluindo deformabilidade, têm sido aplicados ao estudo da fratura em rocha (Gao e Stead, 2014; Ghazvinian *et al.*, 2014; Hamdi *et al.*, 2014). Quando comparados com os modelos MP com base em partículas esféricas, os modelos do tipo poliédrico são computacionalmente mais exigentes (exigem a deteção e atualização dos contactos) limitando o número de partículas a adotar e exigindo algoritmos de solução mais complexos, como por exemplo técnicas de paralelização. Por este motivo, modelos MP 2D continuam a ser desenvolvidos e propostos para o estudo da fratura em rocha. De modo a melhorar o desempenho dos modelos MP, a envolvente de rotura e o quociente entre os valores de tensão de tração/compressão simples, vários desenvolvimentos têm sido propostos, nomeadamente a adoção de geometrias mais complexas com base em aglomerados de partículas circulares (Cho *et al.*, 2007), ou a adoção de partículas poligonais (Potyondy, 2010; Kazerani e Zhao, 2010; Lan *et al.*, 2010; Kazerani, 2011). Em Azevedo *et al.* (2015) é apresentado um modelo MP 2D, com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi da estrutura granular, que permite obter uma relação

entre a resistência à compressão simples e à tração uniaxial bem como uma envolvente de rotura próxima da obtida experimentalmente numa rocha granítica. No mesmo artigo refere-se ainda que a adoção de um critério de rotura com enfraquecimento é fundamental de modo a obter-se no ensaio do tipo Brasileiro um valor de tensão de tração indireta última da ordem do valor obtido em tracção simples.

Neste artigo propõe-se um modelo discreto de partículas 3D com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi da estrutura granular. O modelo 3D de contacto apresentado, VGCM-3D, permite a interacção entre partículas de natureza poliédrica com uma forma mais próxima da estrutura granular observada em rocha. Apresenta a vantagem de manter os reduzidos custos computacionais associados aos modelos de partículas esféricas, quando comparados com os modelos de interacção necessários em partículas do tipo poliédrico. As partículas poliédricas são aproximadas por partículas esféricas, que interagem entre si com base num modelo de contacto múltiplo em que a superfície de contacto é definida com base na faceta comum aos diagramas de Laguerre-Voronoi que representam as partículas em contacto.

Apresentam-se vários estudos paramétricos para caracterização dos parâmetros do modelo e analisa-se a influência destes parâmetros no comportamento macroscópico reproduzido, nomeadamente na resistência à compressão simples e à tração simples, e nos valores de atrito interno e coesão. Demonstra-se que após a calibração dos parâmetros é possível obter uma resposta próxima da obtida em amostras de granito, quer com um modelo frágil quer com um modelo com enfraquecimento bilinear. Tal como no modelo 2D proposto em Azevedo *et al.* (2015), verifica-se a importância da adoção de um modelo com enfraquecimento de forma a ser obtido um quociente entre o valor da tensão da tração simples/tensão de tração indireta da ordem de grandeza do obtido experimentalmente.

2 – FORMULAÇÃO

2.1 – Fundamentos

No modelo discreto MP o domínio é discretizado com base num sistema de partículas que representam a estrutura granular do material e que interagem entre si através das interfaces de contacto. As forças que atuam em cada partícula são definidas com base nos deslocamentos relativos entre a partícula e as partículas vizinhas. Em cada passo de cálculo, dadas as forças aplicadas, calculam-se as novas posições e velocidades com base na segunda lei de Newton. As equações do movimento de cada partícula, adotando um amortecimento local não viscoso, são dadas por:

$$F_i(t) + F_i^d(t) = m\ddot{x}_i \quad (1)$$

$$M_i(t) + M_i^d(t) = I\dot{\omega}_i \quad (2)$$

em que $F_i(t)$ e $M_i(t)$ correspondem, respetivamente, à força total e momento total aplicados no instante t , m e I correspondem à massa e inércia da partícula, \ddot{x}_i é a aceleração da partícula e $\dot{\omega}_i$ é a aceleração angular da partícula. A equação 2 representa a equação do movimento rotacional para uma partícula esférica. Tal como já referido, no modelo MP proposto as partículas apresentam uma geometria poliédrica dada pelos diagramas de Laguerre-Voronoi dos centros de gravidade da estrutura granular. Para geometrias não esféricas a equação de movimento rotacional é mais complexa do que a indicada na equação 2, sendo necessário definir o tensor de inércia de cada partícula e a velocidade angular em cada instante. Se as velocidades angulares forem relevantes é necessário recorrer a esquemas iterativos dado o carácter não linear das equações de movimento. Nas simulações apresentadas adota-se um regime quasi-estático com base num algoritmo de massas escaladas. Assim, optou-se por não realizar uma integração correta do movimento rotacional, aplicando-se de forma simplificada a equação 2.

A força e o momento devidos ao amortecimento local não viscoso são determinados com base nas seguintes expressões:

$$F_i^d(t) = -\alpha|F_i(t)|\text{sign}(\dot{x}_i) \quad (3)$$

$$M_i^d(t) = -\alpha|M_i(t)|\text{sign}(\omega_i) \quad (4)$$

sendo \dot{x}_i a velocidade da partícula, ω_i a velocidade angular da partícula, α o coeficiente de amortecimento local não viscoso e a função $\text{sign}(x)$ dada por:

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} +1, & x > 0 \\ -1, & x < 0 \\ 0, & x = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Tal como indicado nas equações 3 e 4, o amortecimento local não viscoso é proporcional 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).

2.2 – Modelo de contacto generalizado com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi da estrutura granular (VGCM-3D)

O modelo de contacto VGCM-3D tem por base o modelo de contacto generalizado proposto em Azevedo e Lemos (2013), GCM-3D, que adota numa superfície de contacto circular um número discreto de pontos onde há transmissão de forças normais e de corte. Na Figura 1 apresenta-se o modelo de contacto GCM-3D para um esquema de discretização com 4 pontos locais (Azevedo e Lemos, 2013).

No modelo de contacto proposto, VGCM-3D, a superfície de contacto e a localização dos pontos de contacto são definidos com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi da estrutura granular. Em Azevedo *et al.* (2015) é proposto um modelo similar em 2D. Assim, a faceta comum entre dois diagramas de Laguerre-Voronoi adjacentes é considerada a superfície de contacto, e os vértices da faceta de Laguerre-Voronoi incluindo o centro de gravidade da faceta são considerados pontos locais (Figura 2).

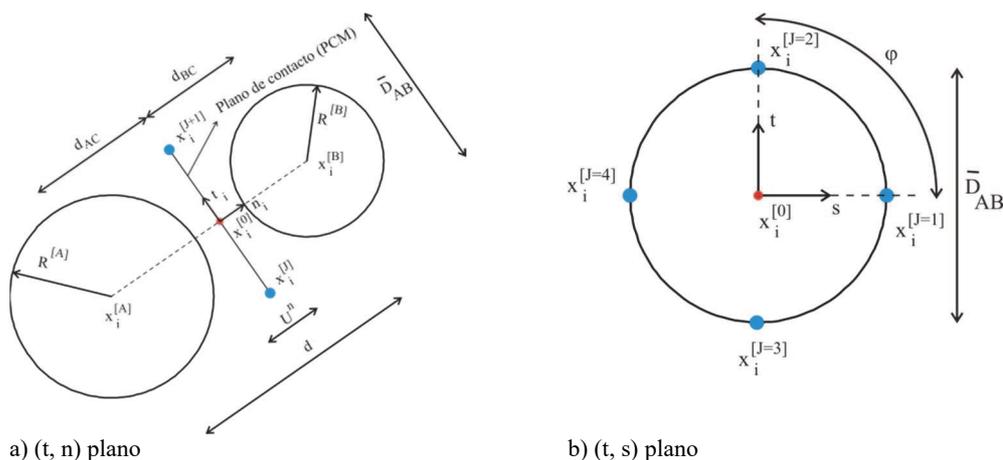


Fig. 1 – Modelo de contacto GCM-3D com 4 pontos locais admitindo uma superfície de contacto circular com uma área equivalente à faceta de Voronoi.

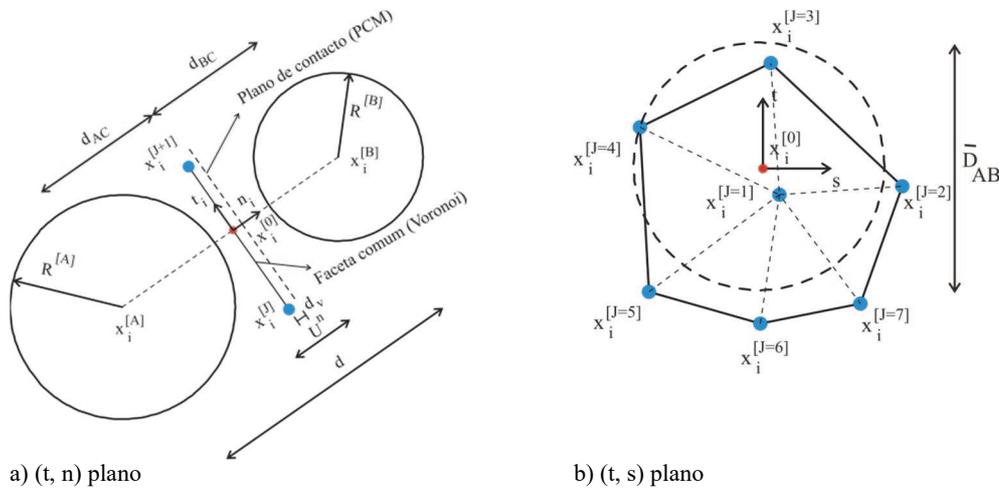


Fig. 2 –Modelo de contacto VGCM-3D com um número variável de pontos locais definido em função dos vértices da faceta de Laguerre-Voronoi e do seu centro de gravidade.

No modelo de contacto VGCM-3D a normal unitária do contacto é definida com base no centro de gravidade das partículas e na distância entre as partículas de acordo com a seguinte equação:

$$n_i = \frac{x_i^{[B]} - x_i^{[A]}}{d} \quad (6)$$

A sobreposição entre partículas no ponto de contacto de referência é definida com base em:

$$U_n^{[0]} = R^{[A]} + R^{[B]} - d \quad (7)$$

No modelo VGCM-3D o ponto de contacto de referência, definido na faceta de Laguerre-Voronoi, é dado por:

$$x_i^{[0]} = x_i^{[A]} + \left(R^{[A]} - \frac{1}{2} U_n^{[0]} - d_v \right) n_i \quad (8)$$

onde d_v é a distância, na direção normal ao plano de contacto, entre o plano de contacto usualmente adotado entre duas partículas esféricas num modelo de contacto pontual (PCM) e o plano de contacto definido pela faceta de Laguerre-Voronoi (Figura 2). Os pontos de contacto locais correspondem inicialmente aos vértices da faceta de Laguerre-Voronoi. A posição de cada ponto de contacto local ($x_i^{[J]}$) em coordenadas globais é definida com base na posição relativa do ponto local num referencial local (t, s) centrado no ponto de contacto de referência (Figura 1 b e Figura 2 b). As posições relativas são definidas no início da simulação tendo em conta as coordenadas globais de cada vértice da faceta de Voronoi e as coordenadas globais do ponto de referência. Assim em cada passo de cálculo a posição de cada ponto local, em coordenadas globais é dada por:

$$x_i^{[J]} = x_i^{[0]} + s^{[J]} x_i^{[s]} + t^{[J]} x_i^{[t]} \quad (9)$$

em que $x_i^{[s]}$ e $x_i^{[t]}$ são, respectivamente, as coordenadas locais segundo o eixo local s e o eixo local t , definidas no eixo de coordenadas globais, com base em $\vec{s} \times \vec{t} = \vec{n}$. A velocidade relativa no ponto de contacto local é considerada constante durante o passo de cálculo e corresponde à diferença entre as velocidades associadas às partículas B e A, nesse mesmo ponto:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i^{[J]} &= \left(\dot{x}_i^{[J]} \right)_B - \left(\dot{x}_i^{[J]} \right)_A \\ &= \left(\dot{x}_i^{[B]} + e_{ijk} \omega_j^{[B]} (x_k^{[J]} - x_k^{[B]}) \right) - \left(\dot{x}_i^{[A]} + e_{ijk} \omega_j^{[A]} (x_k^{[J]} - x_k^{[A]}) \right) \end{aligned} \quad (10)$$

em que e_{ijk} é o símbolo de permutação. O incremento de deslocamento na direcção normal, $(\Delta x^{[J,N]})$ armazenado na forma escalar, e o incremento de deslocamento na direcção de corte, $(\Delta x_i^{[J,S]})$, armazenado na forma vectorial, são definidos através das seguintes expressões:

$$\Delta x^{[J,N]} = \left(\dot{x}_i^{[J]} \Delta t \right) n_i \quad (11)$$

$$\Delta x_i^{[J,S]} = \left(\dot{x}_i^{[J]} \Delta t \right) - \Delta x^{[J,N]} n_i \quad (12)$$

Em cada ponto local a sobreposição entre partículas é definida de forma incremental com base na velocidade de contacto e no passo de cálculo (Δt):

$$U^{J,n} = U^{J,n \text{ old}} + \left(\dot{x}_i^{[J]} n_i \right) \Delta t \quad (13)$$

Os incrementos de força no contacto nas direcções consideradas (normal e corte) são determinados com base numa relação força/deslocamento incremental linear:

$$\Delta F^{[J,N]} = -k_n^{[J]} \Delta x^{[J,N]} \quad (14)$$

$$\Delta F_i^{[J,S]} = -k_s^{[J]} \Delta x_i^{[J,S]} \quad (15)$$

onde $k_n^{[J]}$ e $k_s^{[J]}$ representam, respectivamente, a rigidez normal e a rigidez de corte associadas ao contacto local. Dado que a força de corte é armazenada na forma vectorial, no sistema de coordenadas globais, é necessário proceder à correção da direcção da força de corte obtida no passo de cálculo anterior com base na aplicação de duas rotações. A primeira rotação é aplicada de modo a corrigir-se a componente de corte dada a rotação que se verifica entre a normal do plano de contacto do passo anterior e a normal do plano de contacto do passo actual. A segunda actualização está relacionada com a velocidade angular das partículas na direcção normal do plano de contacto actual. Assim, a força de contacto de corte corrigida assumindo pequenas rotações é dada por:

$$F_i^{[J,S,old1]} = F_i^{[J,S,old]} - e_{ijk} e_{kmn} F_j^{[J,S,old]} n_m^{old} n_n \quad (16)$$

$$F_i^{[J,S,old2]} = F_i^{[J,S,old1]} - e_{ijk} F_j^{[J,S,old1]} \langle w_k \rangle \Delta t \quad (17)$$

sendo $\langle w_k \rangle$ a velocidade angular média das partículas em contacto segundo a direcção normal do plano de contacto actual. Em Itasca (2005) está descrito em detalhe como é feita a correção da força de corte com base numa hipótese de pequenas rotações. A actualização das componentes, normal e de corte, da força no ponto de contacto local é efetuada de acordo com as seguintes expressões:

$$F^{[J,N \text{ new}]} = F^{[J,N \text{ old}]} + \Delta F^{[J,N]} \quad (18)$$

$$F_i^{[J,S \text{ new}]} = F_i^{[J,S \text{ old2}]} + \Delta F_i^{[J,S]} \quad (19)$$

Se as forças de contacto atualizadas não satisfizerem o modelo constitutivo é necessário realizar um ajustamento dependente do modelo considerado. A força resultante exercida sobre cada ponto local é calculada através da seguinte expressão:

$$F_i^{[J]} = F^{[J,N]}n_i + F_i^{[J,S]} \quad (20)$$

A força e o momento 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:

$$F_i^{[C]} = \sum_J F_i^{[J]} \quad (21)$$

$$M_i^{[C]} = - \sum_J e_{ijk}(x_j^J - x_j^0)F_k^J \quad (22)$$

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:

$$F_i^{[A]} = F_i^{[A]} - F_i^{[C]} \quad (23)$$

$$F_i^{[B]} = F_i^{[B]} + F_i^{[C]} \quad (24)$$

$$M_i^{[A]} = M_i^{[A]} - e_{ijk}(x_j^{[0]} - x_j^{[A]})F_k^{[C]} - M_i^{[C]} \quad (25)$$

$$M_i^{[B]} = M_i^{[B]} + e_{ijk}(x_j^{[0]} - x_j^{[B]})F_k^{[C]} + M_i^{[C]} \quad (26)$$

2.3 – Estabilidade numérica

Caso se pretenda obter a solução estática é possível recorrer a um algoritmo que permite escalar as massas, de modo a reduzir o número de passos necessários para obter a solução desejada (Underwood, 1983). 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. Nos exemplos apresentados neste trabalho 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:

$$m_{scaled} = 0.25K_t \quad (27)$$

$$I_{scaled} = 0.25K_\theta \quad (28)$$

As equações 27 e 28 resultam 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 VGCM-3D (Azevedo e Lemos, 2013) obtêm-se os seguintes valores máximo de rigidez de translação, K_t , e de rigidez rotacional, K_θ , que têm de ser definidos em cada passo de cálculo:

$$K_t = \sum_{c=1}^N 2 \left(\sum_j k_n^{[J]} + \sum_j k_s^{[J]} \right) \quad (29)$$

$$K_{\theta} = \sum_{c=1}^N [k_s d_{AC}^2 + k_s d_{AC} d_{BC} + 2\bar{k}_s \bar{R}^2 + 2\bar{k}_n \bar{R}^2] \quad (30)$$

sendo $d_{AC} = \left\| x_i^{[A]} - x_i^{[0]} \right\|$ e $d_{BC} = \left\| x_i^{[B]} - x_i^{[0]} \right\|$ a norma Euclideana dos vetores representados, $\sum_{c=1}^N$ o somatório ao longo dos "N" contactos associados a uma dada partícula, $k_n^{[J]}$ e $k_s^{[J]}$ a rigidez de contacto na direcção normal e de corte, respectivamente, associadas ao ponto de contacto local J, $\bar{R}^2 = ((s^J)^2 + (t^J)^2)$, onde $(s^J)^2$ e $(t^J)^2$ são as coordenadas locais do ponto de contacto J, $k_s = \sum_j k_s^{[J]}$, $\bar{k}_s \bar{R}^2 = \sum_j k_s^{[J]} ((s^J)^2 + (t^J)^2)$, $\bar{k}_n \bar{R}^2 = \sum_j k_n^{[J]} ((s^J)^2 + (t^J)^2)$ e por fim \sum_j que representa o somatório de todos os pontos locais adotados na discretização de uma dada superfície de contacto.

2.4 – Propriedades elásticas do contacto

O modelo de contacto VGCM-3D requer a definição dos parâmetros de deformabilidade do contacto, nomeadamente, do módulo de Young do material contínuo equivalente, \bar{E} , do fator de rigidez que relaciona a rigidez de corte com a rigidez normal do contacto, η e da espessura equivalente do material contínuo equivalente, d , que está associada à estrutura granular adotada. A rigidez total do contacto, nas direcções normal e corte, é dada pelas seguintes expressões:

$$k_n^{[J]} = \frac{\bar{E}}{d} A_c^{[J]} \quad (31)$$

$$k_s^{[J]} = \eta k_n^{[J]} \quad (32)$$

em que $A_c^{[J]}$ é a área de contacto associada ao ponto local J e d é a distância entre o centro de gravidade das partículas em contacto. Tal como referido, a superfície de contacto é definida com base na faceta de Laguerre-Voronoi (Okabe *et al.*, 1992). A Figura 2 b) mostra que a superfície é discretizada com uma malha triangular, e a área de contacto associada a um dado ponto local é dada pela soma de um terço das áreas dos triângulos com vértice no ponto de contacto local J.

2.5 – Propriedades resistentes do contacto

O modelo VGCM-3D requer também a definição das propriedades resistentes do contacto, 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) . A resistência última de tração do contacto local $(F_{n,max}^{[J]})$ e a resistência última de corte $(F_{s,max}^{[J]})$ são definidas com base nas propriedades resistentes adotadas e com base no valor actual da componente normal da força do contacto $(F_n^{[J]})$:

$$F_{n,max}^{[J]} = \sigma_{n,t} A_c^{[J]} \quad (33)$$

$$F_{s,max}^{[J]} = \tau A_c^{[J]} + F_n^{[J]} \mu_c = C_{max}^{[J]} + F_n^{[J]} \mu_c \quad (34)$$

onde $C_{max}^{[J]}$ é o valor máximo de coesão do contacto. Na Figura 3 apresenta-se o modelo de contacto de enfraquecimento bilinear adotado na direcção normal e na direcção de corte (Rokugo, 1989). O modelo de contacto com enfraquecimento bilinear requer a definição da energia de fratura de tração $(G_{f,n})$ e da energia de fratura de corte $(G_{f,s})$. De acordo com o indicado na Figura 3, a partir do momento em que os valores de resistência (tração e corte) são atingidos, o valor máximo de força de tração resistente máximo e/ou coesão máxima são reduzidos com base

no valor de dano, que varia entre 0, sem dano, e 1, em que o contacto é considerado fendilhado só funcionando em atrito puro. Se o fendilhamento ocorrer por dano em tração/corte considera-se como sendo uma fenda de tração; se o fendilhamento ocorrer em compressão/corte o contacto é considerado como sendo uma fenda de corte.

O valor de dano em tração é definido com base no deslocamento máximo atingido pelo ponto local do contacto na direcção normal ($D_n^J(U_n^J)$) (Figura 3 a), e o valor de dano de coesão é definido com base no valor máximo atingido de deslocamento na direcção de corte ($D_s^J(U_s^J)$). Tal como indicado na Figura 3 b) só o termo de coesão é afectado pelo valor de dano. Na Figura 3 b) é igualmente apresentada a evolução da resistência total de corte do ponto de contacto local que tem para além da coesão a consideração do termo de atrito associado à força de contacto normal (F_n^J).

Em cada ponto de contacto local o valor de dano (D_c^J) é dado pela soma da componente normal de tração e pela componente de corte. Com base no valor de dano actualizado do ponto local do contacto, a resistência máxima de tração e coesão do ponto são dadas por:

$$F_{n,max}^{J.Current} = D_c^J F_{n,max}^J \quad (35)$$

$$C_{max}^{J.Current} = D_c^J C_{max}^J \quad (36)$$

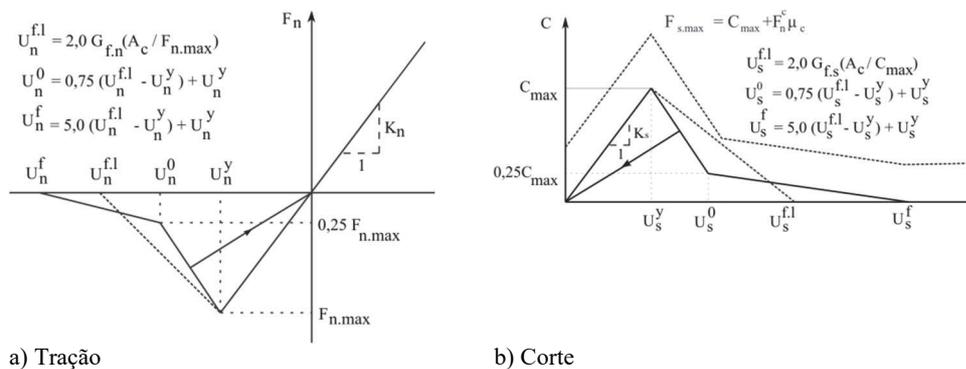


Fig. 3 – Modelo constitutivo com enfrachecimento bilinear em tração e corte.

Se a energia de fratura associada ao contacto for igual à componente elástica, o modelo de enfrachecimento bilinear tem uma resposta idêntica à de um modelo frágil, assumindo um critério de rotura de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite. Ao adotar-se um modelo de contacto de enfrachecimento bilinear a propagação da fratura ocorre de forma mais suave e controlada do que quando se utiliza um modelo frágil. De referir, no entanto, que a resposta macroscópica mesmo com um modelo de contacto com enfrachecimento bilinear continua a ter um carácter frágil.

2.6 – Geração do modelo de partículas

No modelo de elementos discretos proposto as partículas representativas da estrutura granular da rocha a analisar são definidas com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi, que são definidos com base na estrutura de tetraedros de Delaunay ponderada dos centros de gravidade da estrutura granular (Okabe *et al.*, 1992).

O diagrama de Voronoi simples associado a um dado ponto, centro de gravidade da partícula, representa o domínio mais próximo do ponto com base numa métrica Euclideana. Os diagramas de Laguerre-Voronoi são construídos com base numa métrica ponderada, que tem em consideração o raio da partícula associado ao ponto. Assim, as arestas dos diagramas de Laguerre-Voronoi são

equidistantes dos círculos associados a cada ponto, enquanto as arestas associadas aos diagramas de Voronoi simples são equidistantes dos pontos. Opta-se por diagramas de Laguerre-Voronoi pois, quando comparados com os diagramas de Voronoi simples, as facetas de Laguerre-Voronoi estão mais próximas do plano de contacto pontual, a meia distância entre as partículas, que é o plano usualmente adotado partindo do princípio que as partículas que interagem têm uma geometria esférica.

A estrutura granular inicial é definida tendo por base uma dada distribuição granular. Inicialmente as partículas são introduzidas com metade do seu raio para evitar a sobreposição entre elementos (Figura 4 a). Depois de inseridas, as partículas retomam o seu raio real (Figura 4 b). 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, PCM, seguindo a formulação do deslocamento total na direção normal.

Numa segunda fase os centros de gravidade das partículas são triangularizados com base num algoritmo de Delaunay ponderado (Okabe *et al.*, 1992). Em seguida, o diagrama de Laguerre-Voronoi associado é construído a partir da estrutura de tetraedros de Delaunay ponderada. Considera-se que duas partículas interagem com base num contato do tipo VGCM-3D quando os Voronoi associados partilharem uma faceta (Figura 2 b). Na Figura 5 é apresentado, para um exemplo 2D, de modo a facilitar a compreensão do processo de geração, a estrutura granular inicial (Figura 5 a), a estrutura triangular de Delaunay ponderada dos centros de gravidade (Figura 5 b) e por fim dos diagramas de Laguerre-Voronoi que seguem de forma aproximada os tamanhos das partículas circulares.

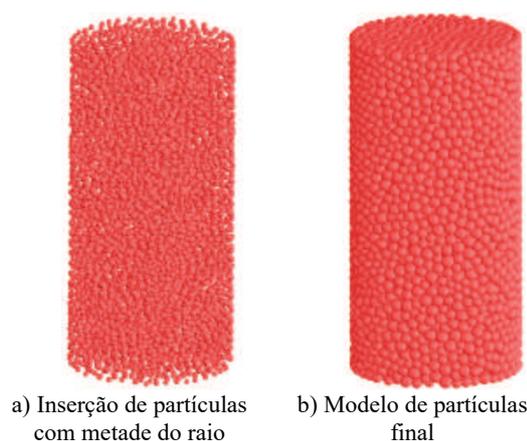


Fig. 4 – Geração da estrutura granular inicial antes da aplicação de um algoritmo de Delaunay ponderado.

No modelo de contacto VGCM-3D as partículas são ainda consideradas esféricas mas interagem com as partículas vizinhas através das facetas de Voronoi de geometria poliédrica (Figura 6 a). 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). Tal como já referido, 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).

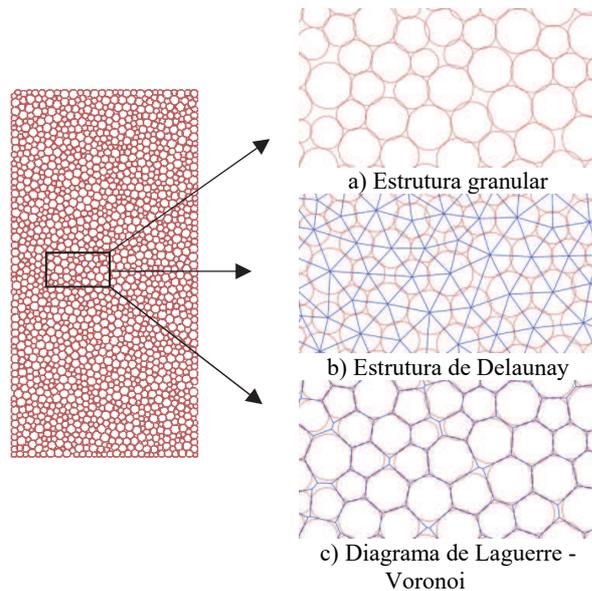


Fig. 5 – Da estrutura granular inicial para uma estrutura poligonal, adaptado de Azevedo *et al.* (2015).

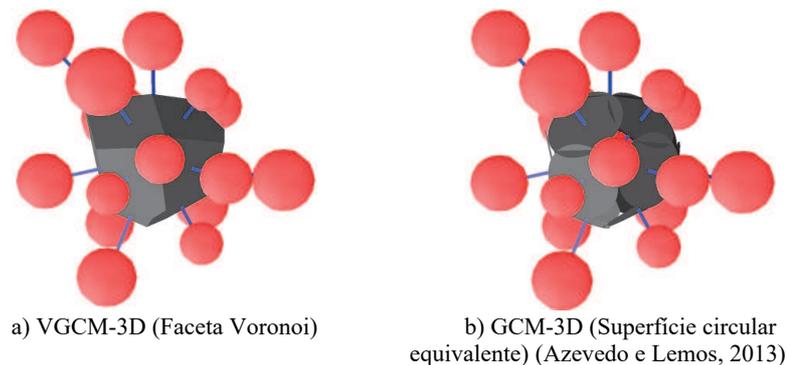


Fig. 6 – Modelo de contacto VGCM-3D e GCM-3D.

O modelo de contacto generalizado proposto em Azevedo e Lemos (2013), GCM-3D, adota numa superfície de contacto circular com área equivalente à faceta de Voronoi um número discreto de pontos que permite a transmissão de forças normais e de corte (Figura 6 b). O modelo de contacto VGCM-3D assume a geometria correta da partícula dada pelo diagrama de Voronoi. Assumir a geometria correta permite não só aumentar a exactidão da interacção mas também facilitar a incorporação de deformabilidade da partícula através da discretização interna de cada partícula com base numa malha de elementos finitos tetraédrica, assunto que será objeto de desenvolvimento futuros.

2.7 – Parâmetros do modelo

O modelo VGCM-3D requer a definição de parâmetros físicos associados aos contactos e às partículas. Os parâmetros associados aos contactos correspondem a parâmetros elásticos e resistentes. É necessário definir 7 parâmetros elásticos e resistentes ao nível do contacto. A

resposta elástica está relacionada com o módulo de Young do material contínuo equivalente, (\bar{E}) e com o fator de rigidez que relaciona a rigidez de corte a e rigidez normal (η). Relativamente aos parâmetros resistentes, é necessário definir a tensão última de tração ($\sigma_{n,t}$), a tensão máxima de coesão (τ), o coeficiente de atrito (μ_c), e as energias de fratura de tração ($G_{f,n}$) e corte ($G_{f,s}$).

A acrescentar aos 7 parâmetros elásticos e resistentes tem-se os parâmetros associados ao sistema de partículas, nomeadamente o diâmetro máximo, (D_{max}), e o diâmetro mínimo, (D_{min}), a distribuição de tamanhos, e a porosidade inicial do sistema de partículas representativo da estrutura granular. Os parâmetros associados ao sistema de partículas deverão ser o mais próximo possível da constituição granular da rocha que se pretende modelar.

Tal como referido, uma das desvantagens deste tipo de modelos está relacionada com o facto de as propriedades dos contactos não poderem ser definidas por via experimental. Assim, estas propriedades têm de ser definidas com base num processo de calibração relativamente moroso de modo a conseguir-se reproduzir o comportamento macroscópico do material a analisar. Nas simulações que são apresentadas adotou-se uma porosidade inicial de 35 % na definição do número de partículas a introduzir (Potyondy e Cundall, 2004). A porosidade adotada não está associada à porosidade da rocha a modelar dado que o esquema de geração adota um sistema de partículas poliédrico com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi com porosidade nula.

3 – ENSAIOS UNIAXIAIS, TRIAXIAIS E DO TIPO BRASILEIRO

3.1 – Introdução

O modelo de partículas proposto foi utilizado na simulação de ensaios uniaxiais, triaxiais e ensaios do tipo Brasileiro, para realização de um estudo paramétrico que visa facilitar o processo de calibração do modelo e avaliar a adequabilidade do modelo para representar o comportamento de uma rocha granítica (Kazerani e Zhao, 2010). Os ensaios uniaxiais e triaxiais foram realizados em amostras cilíndricas com 80 mm de diâmetro e 160 mm de altura; os ensaios do tipo Brasileiro foram realizados em amostras cilíndricas com 80 mm de diâmetro e 40 mm de espessura (Figura 7).

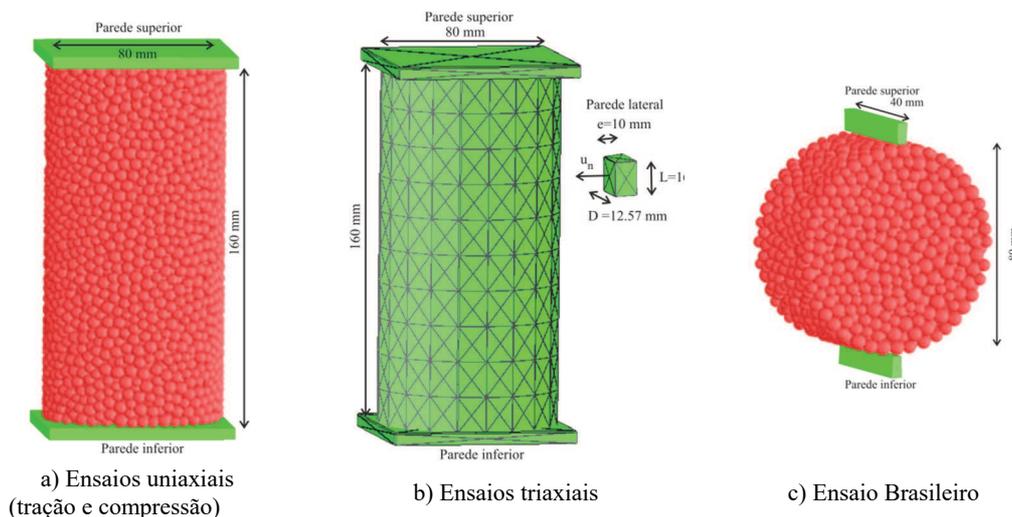


Fig. 7 – Modelos de elementos discretos VGCM-3D adotados: representação da estrutura granular inicial.

De acordo com o indicado em Kazerani (2011), a estrutura granular do granito Ocelar (*Augig granite* na terminologia inglesa) apresenta grãos com tamanhos compreendidos entre 2 mm e 6 mm de diâmetro. Nos ensaios numéricos realizados adotou-se, por razões computacionais, uma distribuição uniforme com partículas de diâmetro compreendido entre 4,0 mm e 6,0 mm de diâmetro. Tal como referido, as distribuições a adotar devem assemelhar-se o mais possível à estrutura granular do material a modelar, quer em termos de distribuição, quer em termos de heterogeneidade. No entanto, só em ensaios numéricos 2D é que é possível ter em consideração discretizações mais detalhadas da rocha (Cho *et al.*, 2007).

Os ensaios numéricos uniaxiais e triaxiais foram realizados em sistemas com um número médio de partículas da ordem de 8000, e os ensaios brasileiros foram realizados com sistemas com um número médio de partículas da ordem de 2000. O número de partículas foi definido com base nas expressões indicadas em Potyondy e Cundall (2004), adotando-se um valor de porosidade de 35% e uma distribuição uniforme.

Nos ensaios triaxiais a tensão de confinamento inicial é aplicada através da parede superior e das paredes laterais. Como se mostra na Figura 7 as paredes laterais são divididas em vários elementos poliédricos, que não interagem entre si, e em que apenas são permitidos deslocamentos na direção radial do provete. A parede superior e a parede inferior, que representam as placas horizontais, só se podem mover na direção vertical. Os contactos partícula-parede apresentam uma rigidez de contacto reduzida, sendo adotada uma rigidez normal de apenas 10% da rigidez média dos contactos inter-partículas. A redução da rigidez de contacto e a subdivisão das paredes laterais pretende reproduzir o comportamento de uma membrana flexível.

A tensão de confinamento inicial é aplicada diretamente à superfície cilíndrica da parede lateral e à parede superior de modo a garantir que cada parede (corpo rígido) aplica no modelo de partículas a tensão de confinamento correta. A força a aplicar na parede lateral na direção normal, que se mantém constante durante o ensaio triaxial, é assim dada por:

$$F_n^{wall} = p A^{wall} \quad (37)$$

onde, p é a tensão de confinamento e A^{wall} é a área de contacto da parede lateral com o sistema de partículas. Para as paredes laterais a área é dada por $A^{wall} = D L$, onde L é a altura da parede e D é a largura da parede medida na superfície interior do elemento em contacto com o sistema de partículas. Para a parede superior a área corresponde à área circular do topo do cilindro ensaiado ($\pi \hat{D}^2/4$), sendo \hat{D} o diâmetro do cilindro usado nos ensaios (80 mm) (Figura 7 a). A parede lateral é subdividida em 200 unidades de placa (Figura 7 b).

Nos ensaios triaxiais, depois de aplicada a tensão isotrópica inicial, a placa superior passa a ter o seu movimento vertical controlado. Aplica-se uma velocidade vertical à placa superior de $0,25 \times 10^{-8}$ m/s de modo a garantir condições de ensaio quase-estáticas e impõe-se um movimento de cima para baixo. Nos ensaios de compressão uniaxial adota-se o mesmo valor de velocidade e o mesmo sentido do movimento, enquanto nos ensaios uniaxiais de tração adota-se o mesmo valor de velocidade mas movimento no sentido oposto. Nos ensaios do tipo Brasileiro aplica-se uma velocidade de $0,25 \times 10^{-8}$ m/s à parede superior.

Em todos os ensaios numéricos realizados: i) adotou-se um coeficiente de amortecimento local elevado, de 0,70, de modo a garantir as condições quase-estáticas e ii) as paredes inferiores são fixas e iii) as paredes transmitem forças às partículas apenas na direção normal. Nos ensaios triaxiais com confinamento e no ensaio Brasileiro as paredes apenas transmitem forças às partículas com que interagem se os contactos se encontrarem sob compressão. Nos ensaios uniaxiais de tração adota-se para os contactos parede/partícula um modelo elástico linear na direção normal. Dada a natureza aleatória dos sistemas de partículas foram ensaiados 4 sistemas de partículas em cada um dos modelos, apresentando-se neste trabalho os valores médios.

3.2 – Estudo paramétrico

O estudo paramétrico apresentado tem como principal objetivo a caracterização dos parâmetros introduzidos no modelo e análise da sua influência na resposta macroscópica do sistema de partículas. Em particular procura-se aferir o efeito dos seguintes parâmetros:

- i) Propriedades elásticas do contacto: \bar{E} , η ;
- ii) Propriedades resistentes do contacto: $\sigma_{n,t}$, τ , μ_c , $G_{f,n}$, $G_{f,s}$.

3.2.1 – Parâmetros de deformabilidade

É analisada a influência dos parâmetros de contacto elástico, nomeadamente do módulo de Young do material contínuo equivalente (\bar{E}) e do fator de rigidez que relaciona a rigidez de corte com a rigidez normal do contacto (η), nas propriedades elásticas macroscópicas, Módulo de Young (E) e coeficiente de Poisson (ν).

Com este propósito foram realizados dois testes numéricos. Numa primeira série de testes as propriedades macroscópicas foram definidas para valores constantes do módulo de Young do material contínuo equivalente ($0,5\bar{E}$, $1,0\bar{E}$ e $2,0\bar{E}$), variando-se o fator de rigidez η . Numa segunda série de testes, as propriedades macroscópicas foram definidas para valores constantes do fator de rigidez η ($0,0$, $0,25$, $0,50$, $0,75$ e $1,0$) variando-se o módulo de Young do material contínuo equivalente. Adotou-se como valor de referência do \bar{E} um módulo de $48,8$ GPa.

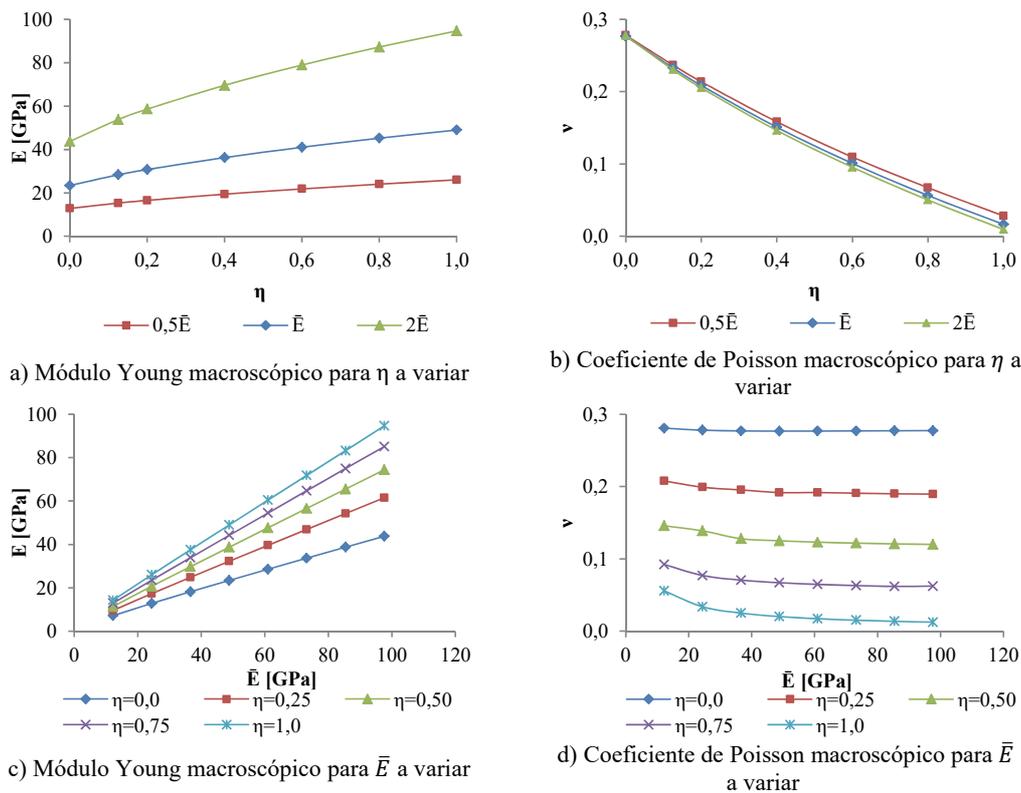


Fig. 8 – Modelos elementos discretos VGCM-3D – Influência dos parâmetros elásticos (\bar{E} e η) nas propriedades macroscópicas elásticas (E e ν).

Da análise da Figura 8 a) e da Figura 8 c) verifica-se que o valor macroscópico do módulo de Young é influenciado pelos dois parâmetros elásticos do contacto, sendo no entanto mais influenciado pelo fator de rigidez η para valores mais elevados de \bar{E} . A Figura 8 b) e a Figura 8 d) mostram que o coeficiente de Poisson macroscópico, para os valores de \bar{E} adotados é influenciado principalmente pelo fator de rigidez (η). Em Diederichs (2000), Potyondy e Cundall (2004) e Wang e Tonon (2009) foram obtidos resultados semelhantes.

Os resultados apresentados mostram que numa fase inicial de calibração do modelo se deve definir o fator de rigidez de modo a obter-se um valor do coeficiente de Poisson macroscópico próximo do desejado. Em seguida deve-se variar o valor do módulo de Young do material contínuo equivalente de forma a obter-se o valor macroscópico do módulo de Young desejado. O valor de \bar{E} igual a 48,8 GPa e um valor de η igual a 0,125, conduzem a valores macroscópicos do módulo de elasticidade de 25,8GPa e do coeficiente de Poisson de 0,23, característicos do granito Ocelar (*Augig granite*).

3.2.2 – Parâmetros de resistência

3.2.2.1 – Tensão máxima de tração e tensão máxima de coesão

Para aferir a influência da tensão máxima de tração e de coesão adotadas no contacto na resposta macroscópica resistente foram realizados ensaios numéricos uniaxiais, triaxiais e do tipo Brasileiro. As propriedades do contacto resistentes indicadas no Quadro 1 correspondem aos valores que produzem uma resposta resistente macroscópica próxima da obtida numa rocha granítica de um granito Ocelar com um modelo de enfraquecimento bilinear.

Foram realizadas duas simulações numéricas distintas. Numa primeira série de testes foi adotado um valor de tensão máxima de tração do contacto de $\sigma_{n,t} = 11,4 \text{ MPa}$ e variou-se a tensão máxima de coesão para uma relação $\tau/\sigma_{n,t}$ a variar de 1 a 4. Numa segunda série de testes fixou-se o valor de tensão máxima de coesão de $\tau = 88,5 \text{ MPa}$ e variou-se a tensão máxima de tração para uma relação $\tau/\sigma_{n,t}$ a variar de 1 a 4. O mesmo valor do termo de atrito do contacto, ($\mu_c = 0,05$) foi adotado em todos os ensaios numéricos. Em cada série de ensaios numéricos adotaram-se 3 valores distintos de energia de fratura de tração e corte: i) um valor de energia de fratura que corresponde somente à parcela elástica do contacto (G_{el}), que, tal como referido, corresponde à adoção de um modelo de contacto frágil; ii) um valor de energia de fratura 4,75 vezes superior à parcela de energia elástica do contacto ($4,75G_{el}$) e iii) um valor de energia de fratura 9,50 vezes superior á parcela de energia elástica do contacto em tração e corte ($9,5G_{el}$), que corresponde à energia de fratura que permite uma resposta do modelo numérico mais próxima da observada numa rocha granítica Ocelar tendo por base um modelo de enfraquecimento bilinear.

Quadro 1 – Propriedades elásticas e resistentes do contacto.

\bar{E} [GPa]	η	$\sigma_{n,t}$ [MPa]	τ [MPa]	$\tau/\sigma_{n,t}$	μ_c
48,8	0,125	11,4	88,5	1, 2, 3, 4	0,05

A Figura 9 permite verificar que a tensão macroscópica de compressão e a tensão de tração indirecta obtida em ensaios Brasileiros são influenciados pela relação $\tau/\sigma_{n,t}$. A Figura 9 a) e a Figura 9 b) mostram que para um valor constante da tensão máxima de tração do contacto um aumento na tensão de coesão máxima origina um aumento significativo dos valores macroscópicos de compressão simples e um acréscimo mais reduzido da tração indirecta, havendo em ambos os casos uma relação praticamente linear com o valor de $\tau/\sigma_{n,t}$. Verifica-se ainda que para um valor constante da tensão máxima de coesão do contacto (Figura 9 c e Figura 9 d), uma redução do valor máximo de tração do contacto tem como consequência uma redução no valor obtido de

compressão simples σ_c e tração indirecta $\sigma_{t,ind}$, sendo a redução mais acentuada para valores mais baixos da relação $\tau/\sigma_{n,t}$. Da Figura 9 conclui-se ainda que um aumento da energia de fratura do contacto, em coesão e corte, origina um aumento da tensão macroscópica de compressão simples e tração indirecta, tendo uma maior influência no aumento da tensão de tração indirecta.

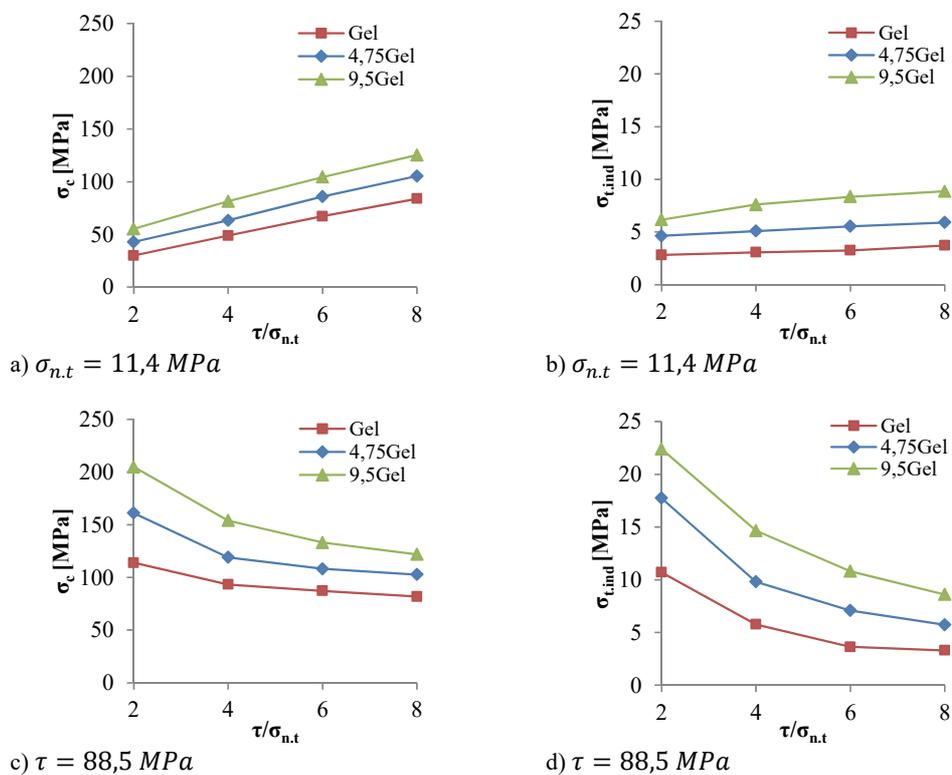


Fig. 9 – Efeito da relação $\tau/\sigma_{n,t}$ na resposta macroscópica em ensaios de compressão e tração: a) e b) para valores constantes da tensão máxima de tração $\sigma_{n,t} = 11,4 \text{ MPa}$; c) e d) para valores máximos da tensão de coesão $\tau = 88,5 \text{ MPa}$.

Da análise da Figura 10 a) e da Figura 10 b) conclui-se que para um valor constante da máxima tensão de tração do contacto um aumento da tensão máxima de coesão τ origina um aumento do ângulo de atrito interno e da coesão obtidas em ensaios triaxiais. Verifica-se ainda que um aumento da energia de fratura do contacto leva a um aumento do valor de coesão e ângulo de atrito interno, sendo que o efeito no ângulo de atrito interno é menor para os valores mais elevados de energia de fratura. Da Figura 10 c) e da Figura 10 d), verifica-se ainda que para um valor constante da tensão máxima de coesão, uma redução na tensão máxima de tração de contacto ($\sigma_{n,t}$) tem uma reduzida influência no ângulo de atrito interno e origina uma redução do valor de coesão obtida em ensaios triaxiais. Verifica-se ainda que um acréscimo da energia de fratura do contacto origina um acréscimo dos valores de coesão, em especial para valores mais baixos da tensão última de tração. A Figura 10 permite ainda concluir que a influência da energia de fratura nos valores de ângulo de atrito interno é complexa, verificando-se que para valores de tensão de tração última mais baixos um acréscimo da energia de fratura pode conduzir a uma redução do ângulo de atrito interno.

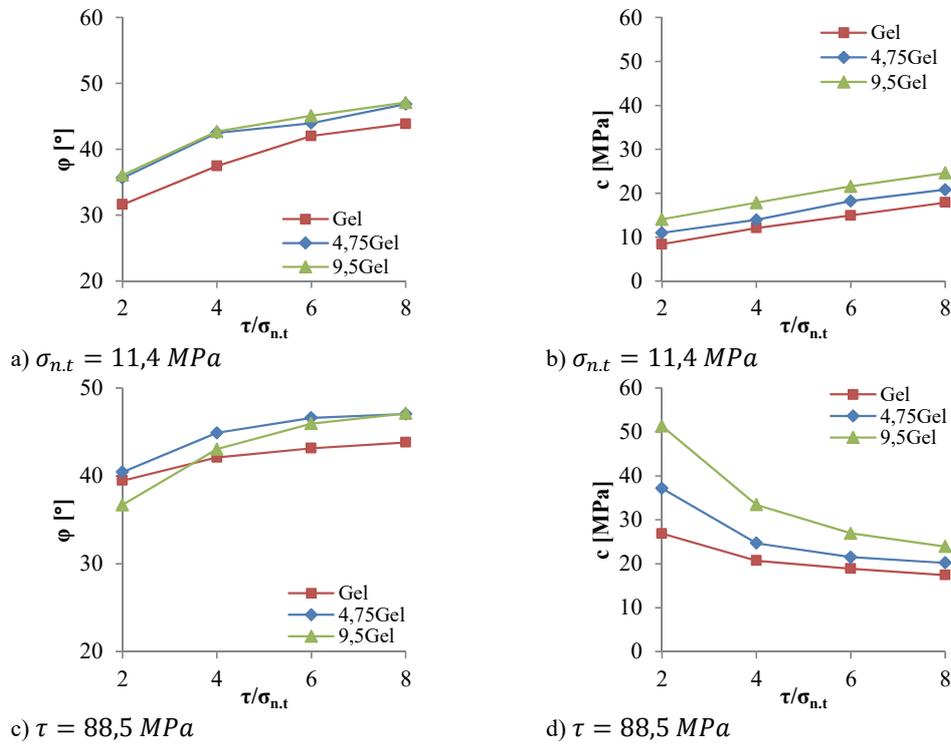


Fig. 10 – Efeito da relação $\tau/\sigma_{n,t}$ nos valores de ângulo de atrito interno e coesão macroscópico: a) e b) para valores constantes da tensão máxima de tração $\sigma_{n,t} = 11,4 \text{ MPa}$; c) e d) para valores máximos da tensão de coesão $\tau = 88,5 \text{ MPa}$.

Da análise da Figura 11 a) e da Figura 11 c) verifica-se que para um valor de tensão de tração máxima constante os rácios macroscópicos entre a tensão de compressão simples e tensão de tração indirecta obtida em ensaios Brasileiros $\sigma_c/\sigma_{t,ind}$ é influenciada pelo rácio $\tau/\sigma_{n,t}$. Para valores mais elevados do quociente $\tau/\sigma_{n,t}$ obtêm-se valores mais elevados do quociente $\sigma_c/\sigma_{t,ind}$. Verifica-se igualmente que quanto maior o valor da energia de fratura adotado menor é o rácio $\sigma_c/\sigma_{t,ind}$ obtido. Das Figuras 11 b) e 11 d) verifica-se que o quociente entre a tensão de tração indirecta obtido em ensaios Brasileiros e o tensão de tração obtidos em ensaios uniaxiais ($\sigma_{t,ind}/\sigma_{t,dir}$) é influenciado pelo quociente $\tau/\sigma_{n,t}$, assim para valores mais elevados do rácio $\tau/\sigma_{n,t}$ maior o rácio $\sigma_{t,ind}/\sigma_{t,dir}$ obtido. Verifica-se ainda que para todas as relações $\tau/\sigma_{n,t}$ adotadas, um modelo de contacto frágil G_{el} ou com valores de energia de fratura mais baixos que o óptimo $4,75G_{el}$ prevê sempre valores de quociente inferiores $\sigma_{t,ind}/\sigma_{t,dir}$ a 1,0. Só com um modelo de enfraquecimento bilinear e para uma energia de fratura de $9,5G_{el}$ e um rácio $\tau/\sigma_{n,t}$ superior a 4 é que se obtêm valores do rácio $\sigma_{t,ind}/\sigma_{t,dir}$ próximos do expectável em rocha (Klanphumesri, 2010; Erarslan e Williams, 2012).

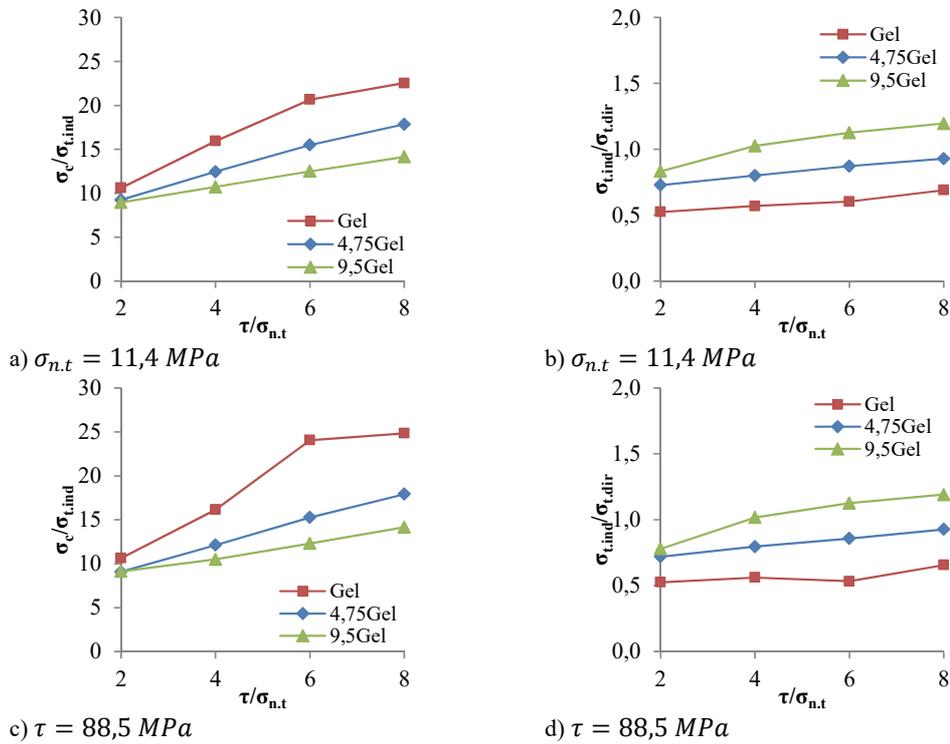


Fig. 11 – Efeito da relação $\tau/\sigma_{n,t}$ nos rácios macroscópicos $\sigma_c/\sigma_{t,ind}$ e $\sigma_{t,ind}/\sigma_{t,dir}$: a) e b) para valores constantes da tensão máxima de tração $\sigma_{n,t} = 11,4 \text{ MPa}$; c) e d) para valores máximos da tensão de coesão $\tau = 88,5 \text{ MPa}$.

3.2.2.2 – Influência do termo de atrito

A influência do parâmetro de atrito do contacto (μ_c) no comportamento macroscópico do sistema de partículas também foi avaliado. Foram realizadas várias simulações numéricas para quatro valores diferentes do quociente $\tau/\sigma_{n,t}$, para um dado valor constante da tensão última de tração $\sigma_{n,t}$, e para dois valores diferentes de energia de fratura do contacto em tração e corte. Adotou-se então um valor de energia de fratura igual ao valor do ramo elástico (G_{el}), que corresponde a assumir-se um modelo de contacto frágil, e um valor de energia de fratura 9,5 vezes superior ao valor elástico em tração e corte ($9,5G_{el}$). No Quadro 2 apresentam-se as propriedades resistentes e elásticas adotadas nas simulações numéricas realizadas.

Quadro 2 – Propriedades elásticas e resistentes do contacto para análise da influência do termo de atrito.

\bar{E} [GPa]	η	$\sigma_{n,t}$ [MPa]	$\tau/\sigma_{n,t}$
48,8	0,125	11,4	1, 2, 3, 4

Da Figura 12 b) e da Figura 12 d) conclui-se que um aumento do termo de atrito do contacto origina um aumento no valor do ângulo de atrito interno, sendo esta influência mais notória para valores do quociente $\tau/\sigma_{n,t}$ mais pequenos. Da Figura 12 a) e da Figura 12 c) verifica-se que um aumento de atrito do contacto conduz a uma ligeira redução da coesão macroscópica do material.

No entanto, quando comparada à influência que esta propriedade tem no ângulo de atrito interno verifica-se que para os dois modelos de contacto analisadas, modelo frágil e com enfraquecimento, a influência na coesão é menor.

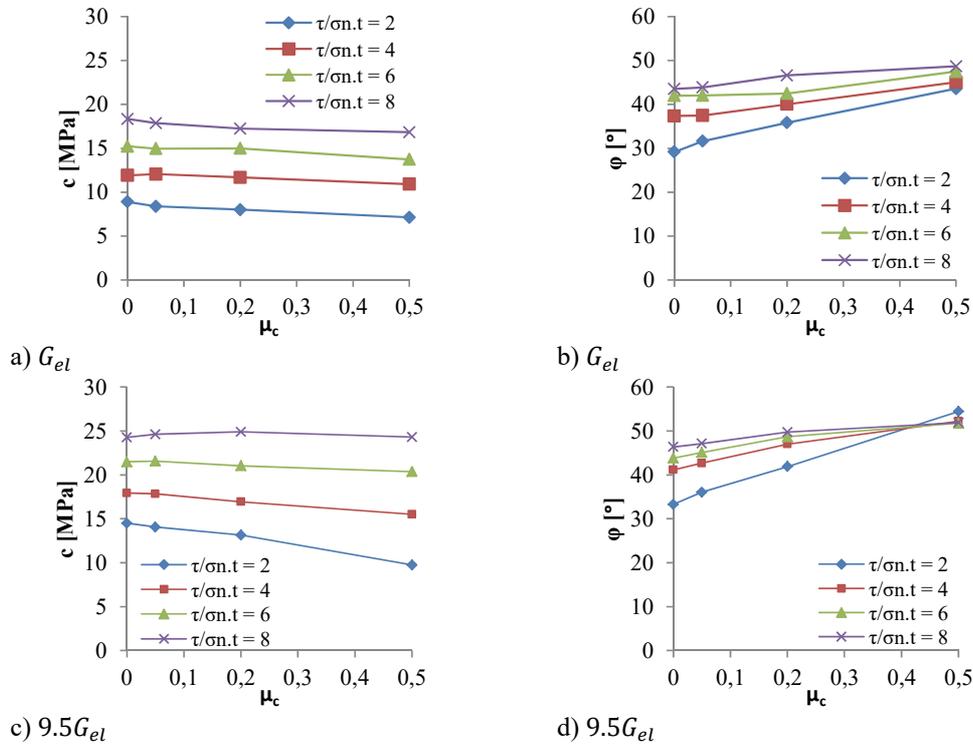


Fig. 12 – Influência do termo de atrito μ_c no valor da coesão e do ângulo de atrito interno a) e b) para um modelo de contacto frágil (G_{el}); c) e d) e para um modelo de enfraquecimento bilinear com uma energia de fratura 9,5 vezes superior ao valor elástico ($9,5G_{el}$).

A Figura 13 mostra que o termo atrito do contacto tem uma influência diminuta no valor da tensão de tração indirecta. Conclui-se ainda que um acréscimo no valor do termo de atrito tem como consequência um ligeiro aumento da tensão de compressão simples quer no modelo frágil G_{el} , quer no modelo com enfraquecimento $9,5G_{el}$, sendo mais notória a sua influência para um modelo com enfraquecimento.

3.3 – Modelo frágil e com enfraquecimento calibrado para o granito Ocelar (*Augig granite*)

Os parâmetros do modelo de contacto frágil (VGCM-3D G_{el}) e do modelo de contacto com enfraquecimento bilinear (VGCM-3D $9,5G_{el}$) foram calibrados de modo a obter-se uma resposta macroscópica, em termos de deformabilidade e resistência, próxima da obtida experimentalmente com um granito Ocelar (Kazerani e Zhao, 2010). Numa primeira fase definiram-se os parâmetros elásticos em ensaios de compressão uniaxial. Do processo iterativo concluiu-se que um valor de módulo de Young equivalente do material contínuo (\bar{E}) igual a 48,8 GPa e um valor do fator de rigidez (η) igual a 0,125 reproduzem, num modelo de partículas com forma poliédrica aproximada e com a distribuição de raios definida em 3,1, um valor de módulo de Young de 25,8 GPa e um valor de coeficiente de Poisson de 0,23, característicos de um granito Ocelar (Kazerani e Zhao, 2010).

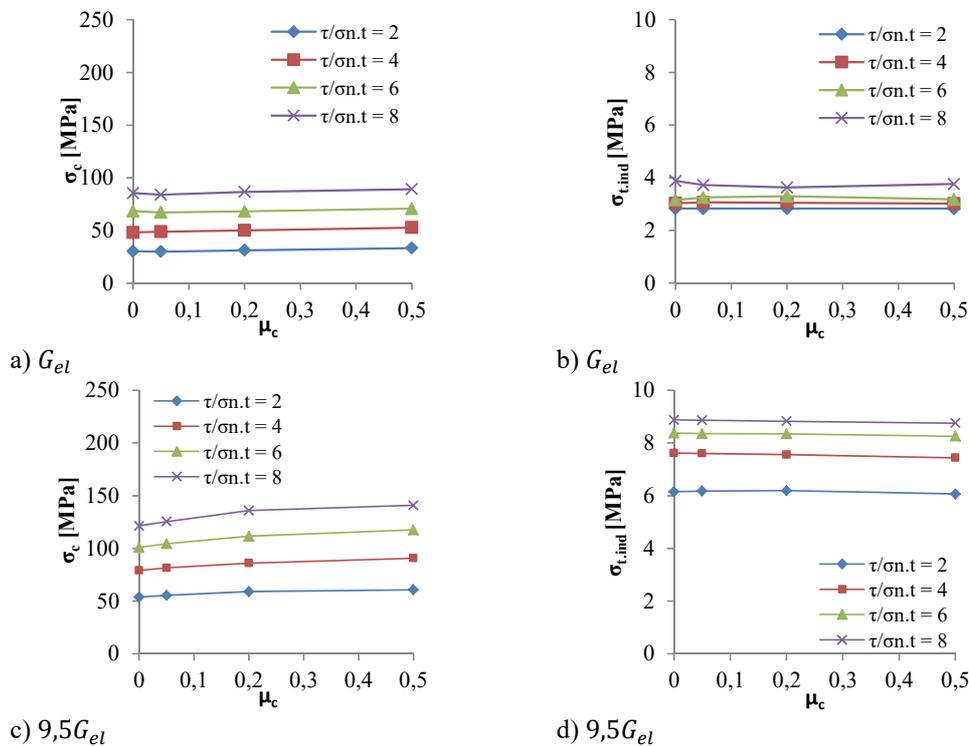


Fig. 13 – Influência do termo de atrito μ_c no valor da macroscópico da tensão de compressão e da tensão de tração indirecta a) e b) para um modelo de contacto frágil (G_{el}); c) e d) e para um modelo de enfraquecimento bilinear com uma energia de fratura 9,5 vezes superior ao valor elástico ($9,5G_{el}$).

O processo de calibração dos parâmetros resistentes é mais complexo uma vez que estes parâmetros influenciam de um modo interdependente os parâmetros resistentes macroscópicos. Assim numa primeira fase estabelece-se um quociente de tensão última de tração e coesão que verifique valores macroscópicos próximos de compressão simples e tração direta. De seguida afinam-se os parâmetros do termo de atrito e energia de fratura de modo a obter-se um ângulo de âtrio interno e um valor de coesão próximos dos obtidos experimentalmente.

No Quadro 3 são apresentadas a propriedades elásticas e resistentes para as quais um modelo frágil e um modelo com enfraquecimento bilinear produzem uma resposta próxima da obtida experimentalmente num granito Ocelar. Na Figura 14 apresenta-se o critério de rotura de Hoek-Brown aplicado aos dados experimentais obtidos para o granito Ocelar (Kazerani e Zhao, 2010). Na mesma figura são apresentados os resultados obtidos quando se utiliza o modelo de contacto frágil (VGCM-3D G_{el}) e o modelo de contacto com enfraquecimento bilinear (VGCM-3D $9,5G_{el}$). Apresentam-se, para ambos os modelos numéricos, os valores de resistência à tração obtidos em ensaios de tração direta e em ensaios de tração indirecta. Comparando as envolventes de rotura obtidas, verifica-se que o modelo VGCM-3D permite a representação da envolvente de rotura semelhante à real, aproximando-se dos resultados experimentais obtidos por Kazerani e Zhao (2010), quer para o modelo frágil quer para o modelo com enfraquecimento.

No Quadro 4 são apresentadas as propriedades macroscópicas conhecidas do granito Ocelar (Kazerani e Zhao, 2010), e as propriedades macroscópicas obtidas com os modelos calibrados, frágil e com enfraquecimento. Verifica-se que após o processo de calibração o modelo MP

proposto apresenta uma boa concordância com os valores obtidos experimentalmente. No entanto, verifica-se que com um modelo de contacto frágil se obtêm valores de resistência à tração de sensivelmente iguais a 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 (Klanphumeesri, 2010; Erarslan e Williams, 2012), tal como o obtido com um modelo de enfraquecimento bilinear. Vários factores contribuem para que a resistência obtida em ensaios brasileiro seja superior à obtida em ensaios de tração simples, nomeadamente o facto de no ensaio de compressão diametral o estado de tensão induzido na zona de aplicação das forças ser complexo, existindo um efeito de cunha, e o plano de rotura final não ser perfeitamente plano.

Quadro 3 – Propriedades elásticas e resistentes do contacto calibradas para o granito Ocelar - Modelo frágil e modelo com enfraquecimento bilinear.

	\bar{E} [GPa]	η	μ_c	$\sigma_{n,t}$ [MPa]	τ [MPa]	$G_{f,n}$ [N/m]	$G_{f,s}$ [N/m]
VGCM-3D G_{el} calibrado	48,8	0,125	0,05	35,5	106,5	6,8	3275,2
VGCM-3D $9,5G_{el}$ calibrado				11,4	88,5	64,6	3114,4

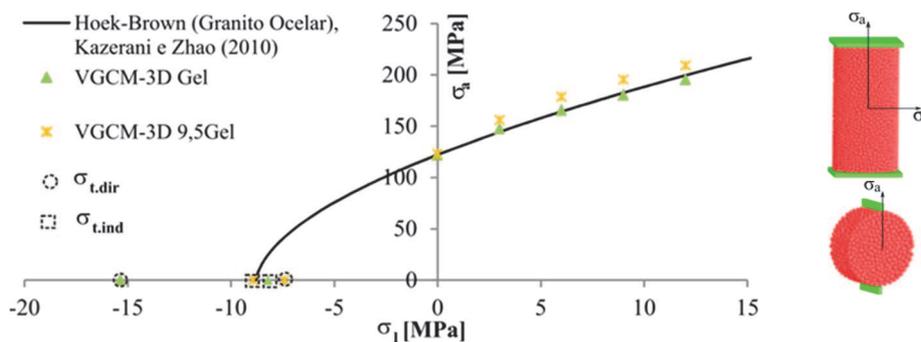


Fig. 14 – Envolvente de rotura, Critério de rotura de Hoek-Brown para o granito Ocelar com base nos ensaios experimentais de Kazerani e Zhao (2010) e valores numéricos com modelo frágil e com enfraquecimento bilinear.

Quadro 4 – Macropropriedades do granito Ocelar: valores numéricos e experimentais.

	E [GPa]	ν	q_u [MPa]	$\sigma_{t,dir}$ [MPa]	$\sigma_{t,ind}$ [MPa]	c [MPa]	φ [°]
Augig granite (Kazerani e Zhao, 2010)	25,8	0,23	122,1	-	8,8	21,0	53,0
VGCM-3D G_{el} calibrado	25,8	0,23	125,2	16,4	8,9	27,1	43,2
VGCM-3D $9,5G_{el}$ calibrado			124,5	7,4	9,1	24,8	46,6

Na Figura 15 apresentam-se as curvas de tensão-deformação à compressão simples e para ensaios triaxiais com tensões de confinamento de 3, 6, 9 e 12 MPa para os dois modelos de contacto calibrado. Da análise da Figura 15 verifica-se que a consideração de uma lei de enfraquecimento ao nível do contacto, para os valores de energia de fratura adotados, não altera o

carácter frágil da resposta macroscópica. Verifica-se ainda que o modelo de contacto frágil (VGCM-3D G_{el}) apresenta para valores de confinamento reduzidos uma inflexão na curva tensão-deformação, que não é tão evidente no modelo com enfraquecimento. Este ponto de inflexão está associado ao valor reduzido do fator de rigidez, necessário a que se obtenha um valor macroscópico de coeficiente de Poisson próximo do experimental. Conclui-se ainda que para valores mais elevados de confinamento ambos os modelos de contacto apresentam, tal como esperado, uma resposta mais dúctil.

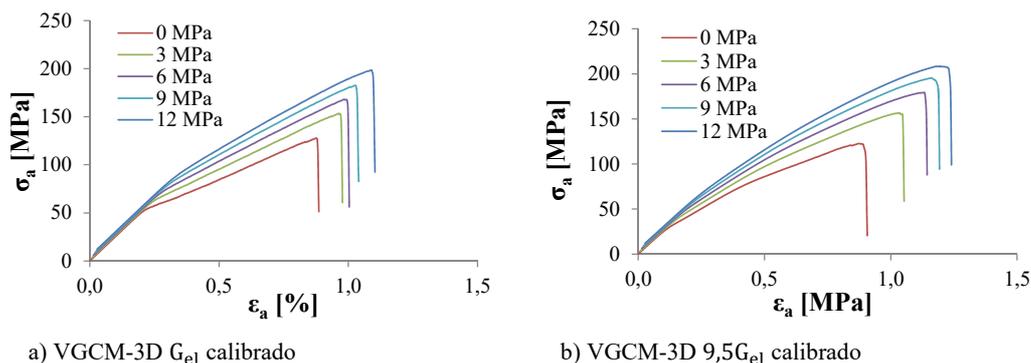


Fig. 15 – Curvas tensão-deformação dos modelos VGCM-3D calibrados: ensaios triaxiais com diferentes tensões de confinamento.

Na Figura 16 apresentam-se as curvas tensão-deformação para os modelos VGCM-3D calibrados (GCM-3D G_{el} e GCM-3D $9,5G_{el}$) em compressão simples e para uma tensão de confinamento de 8,0 MPa. Da comparação dos resultados numéricos obtidos com a curva experimental (Kazerani e Zhao, 2010), conclui-se que o modelo proposto permite simular o comportamento à compressão do material e a influência da tensão de confinamento. Tal como referido, os modelos 3D apresentam uma ligeira inflexão para um valor relativamente baixo da tensão de compressão, conduzindo a que os valores de compressão máximos sejam obtidos para valores de deformação axial mais elevados do que os obtidos experimentalmente e com um modelo equivalente em 2D. É de notar que a curva obtida no ensaio laboratorial traduz, numa fase inicial, o fecho de fendas pré-existentes na amostra, apresentando uma menor rigidez inicial. Este fenómeno não é reproduzido pelos modelos de partículas, pois estes representam o material como rocha intacta de porosidade inicial nula.

Os padrões de fratura obtidos através do modelo VGCM-3D calibrado para o ensaio de compressão simples, à tração direta, triaxial com uma tensão de confinamento de 9MPa e à tração indireta (do tipo Brasileiro), são apresentados na Figura 17. 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 17 a). No ensaio triaxial com a tensão de confinamento de 9MPa (Figura 17 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 17 b), e no ensaio de tração indireta a superfície de rotura é paralela à carga (Figura 17 d).

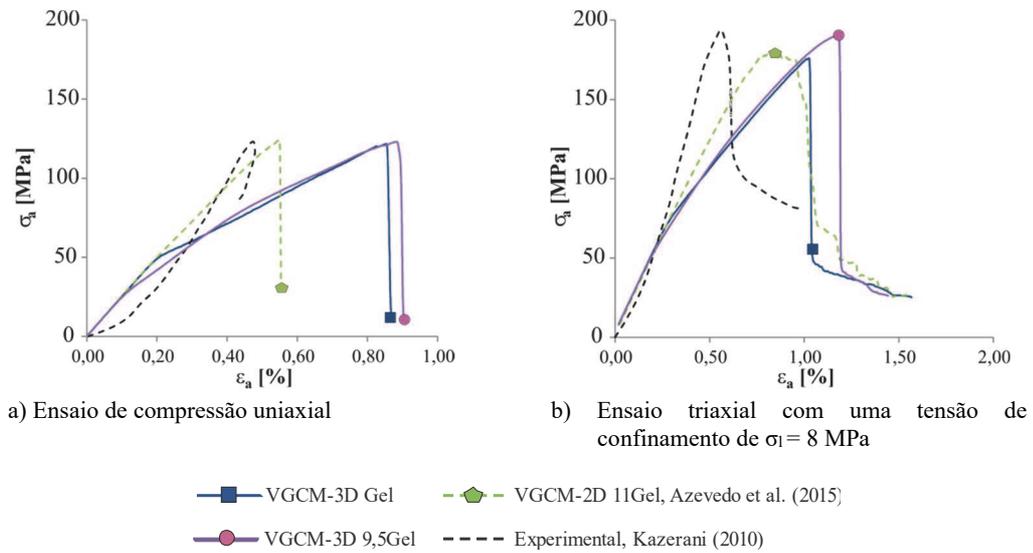


Fig. 16 – Curvas tensão-deformação dos modelos VGCM-3D calibrados, resultados experimentais de Kazerani e Zhao (2010) e valores numéricos obtidos com uma versão 2D do modelo proposto (Azevedo *et al.*, 2015).

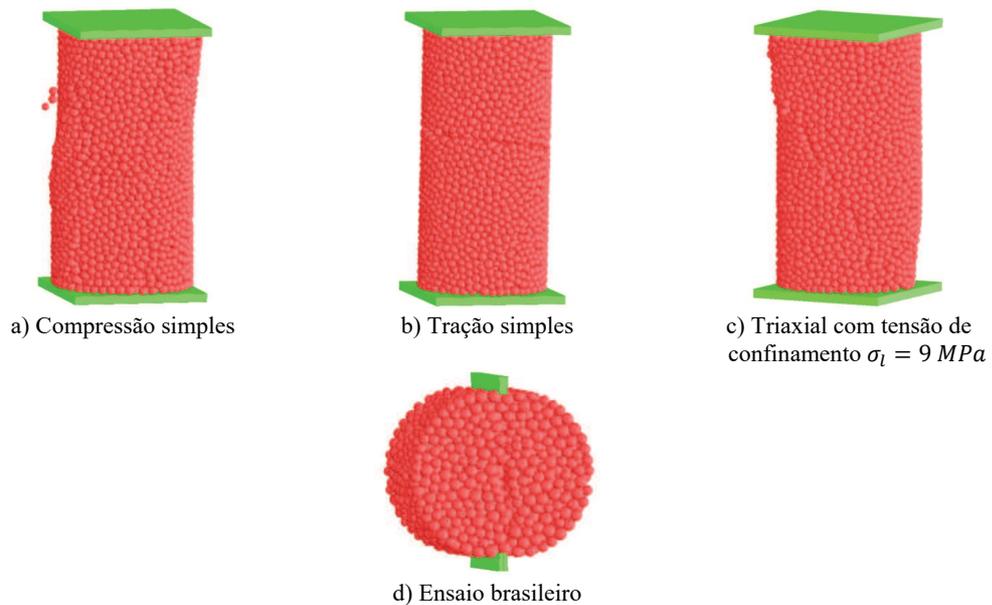


Fig. 17 – Padrões de rotura obtidos com o modelo VGCM-3D $9,5G_{el}$ calibrado.

Na Figura 18 apresenta-se a evolução do dano no contacto em tração e corte, bem como a evolução da tensão axial e da extensão volumétrica para os modelos VGCM-3D G_{el} e VGCM-3D $9,5G_{el}$. O processo de fratura inicia-se em ambos os modelos com o aparecimento de

fendas por dano em tração, atingindo-se o seu valor máximo próximo do valor de pico. Só para valores de tensão axial próximos do valor de pico é que se regista o aparecimento de dano de contacto sob corte/compressão. Este processo de fratura é parecido com o que ocorre em rocha, (Brace *et al.*, 1966; Martin e Chandler, 1994; Diederichs, 2003). A Figura 18 permite verificar que a incorporação de um modelo de dano com enfraquecimento suaviza a resposta (deformação volumétrica, curva-tensão deformação) mas não altera o carácter frágil após ser atingido o valor de pico.

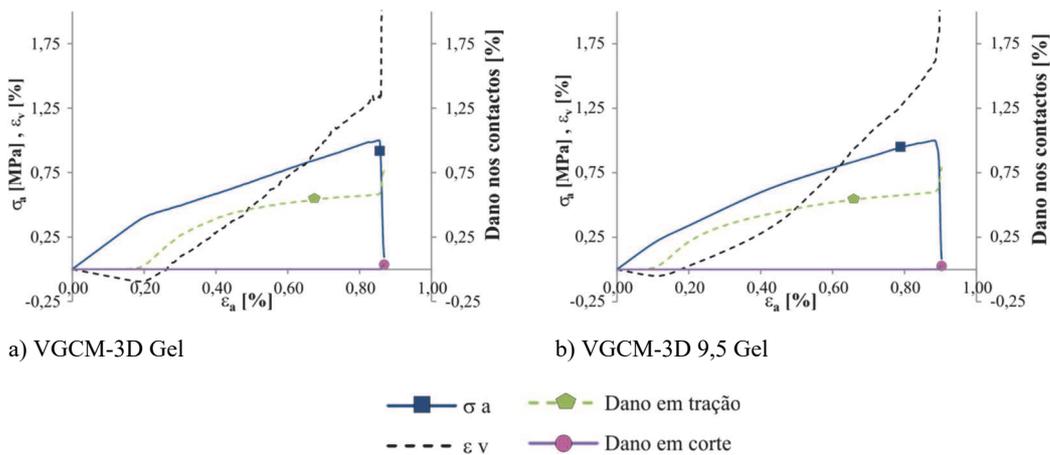


Fig. 18 – Relação da tensão axial, deformação volumétrica e valores de dano a deformação axial em ensaios de compressão simples obtidas com os modelos VGCM-3D calibrados.

4 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

O modelo de partículas proposto, VGCM-3D, permite reproduzir, após calibração das propriedades associadas aos contactos, o processo de rotura em rocha em ensaios uniaxiais, triaxiais e em ensaios do tipo Brasileiro. Os resultados numéricos evidenciam que os modelos MP constituem uma abordagem alternativa à análise de processos de fratura e que a resposta macroscópica complexa aparece em função de modelos de interacção simples entre partículas.

No modelo de partículas 3D proposto a superfície de contacto é definida com base nos diagramas de Laguerre-Voronoi dos centros de gravidade das partículas que representam a estrutura granular. Assim, é possível simular de forma aproximada modelos de partículas de geometria poliédrica mais próxima da observada em rocha, mantendo-se no entanto desempenhos computacionais próximos dos modelos de partículas esféricas. O modelo de contacto proposto, ao assumir a geometria correta da partícula, facilita a incorporação de deformabilidade da partícula através da discretização interna de cada partícula com base numa malha de elementos finitos tetraédrica.

O estudo paramétrico apresentado contribuiu para a caracterização dos parâmetros do modelo de partículas VGCM-3D e para a avaliação dos efeitos de cada um dos parâmetros no comportamento macroscópico da rocha. Os resultados apresentados facilitam a calibração dos parâmetros, que, dada a natureza dos modelos MP, tem de ser realizada para cada tipo de material que se está a analisar. Tal como apresentado, os parâmetros de deformabilidade do modelo são de mais fácil obtenção dado que podem ser obtidos de forma quase direta. Numa fase inicial deve-se definir o fator de rigidez de modo a obter-se um valor do coeficiente de Poisson macroscópico próximo do desejado em ensaios uniaxiais. Em seguida varia-se o valor do módulo de Young do

material contínuo equivalente de modo a obter-se o valor macroscópico do módulo de Young desejado. O processo de calibração dos parâmetros de resistência é mais moroso dado que os vários parâmetros resistentes influenciam a resposta macroscópica. Os parâmetros principais são a tensão de tração última e a relação desta tensão com o valor de tensão de coesão última do contacto.

Das análises efectuadas conclui-se que o critério de rotura com enfraquecimento é mais adequado, apresentando vantagens relativamente ao critério de rotura frágil. Tal como referido, o modelo de rotura frágil em ensaios do tipo Brasileiro subestima o valor da tensão de tração última em relação aos valores obtidos num ensaio direto. Dado o reduzido valor de energia de fratura que é necessário adotar ao nível do contacto, os modelos com leis de enfraquecimento nos contactos continuam a apresentar uma resposta frágil, característica da rocha quer em tração quer em compressão simples.

5 – AGRADECIMENTOS

Este trabalho, inicialmente desenvolvido no âmbito do projeto de investigação PTDC/ECM/114492/2009, financiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia, é parte do projeto de investigação DAMFA – Soluções de ponta para a avaliação sustentável das fundações de barragens de betão promovido pelo LNEC.

6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Azevedo, N. (2003). *Micromechanical study of rock fracture and fragmentation under dynamic loads using discrete element method*. PhD Thesis. Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland.
- Azevedo, N.; Lemos, J. (2013). *A 3D generalized rigid particle contact model for rock fracture*. Engineering Computations, vol. 30(2), pp. 277-300.
- Azevedo, N.; Candeias, M.; Gouveia, F. (2015). *A rigid particle model for rock fracture following the Voronoi tessellation of the grain structure: Formulation and Validation*, Rock Mechanics and Rock Engineering, vol. 48(2), pp. 535-557.
- Bolander, J.; Saito, S. (1998). *Fracture analyses using spring networks with random geometry*. Engineering Fracture Mechanics, vol. 61(5/6), pp. 569-591.
- Brace W.; Paulding B.; Scholz C. (1966). *Dilatancy in the fracture of crystalline rocks*. Journal of Geophysical Research, vol. 71(16), pp. 3939-3953.
- Chang, K.G.; Meegoda, J.N. (1997). *Micromechanical simulation of hot mix asphalt*. Journal of Engineering Mechanics, ASCE, vol. 123(5), pp. 495-503.
- Cho, N.; Martin, C.; Sego, D.C. (2007). *A clumped particle model for rock*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, vol. 44(7), pp. 997-1010.
- Diederichs, M.S. (2000). *Instability of hard rock masses: the role of tensile damage and relaxation*. PhD Thesis. University of Waterloo, Canada.
- Diederichs, M.S. (2003). *Rock fracture collapse under low confinement conditions*. Rock Mechanics and Rock Engineering, vol. 36(5), pp. 339-381.
- Erarslan, N.; Williams, D. (2012). *Experimental, numerical and analytical studies on tensile strength of rocks*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, vol. 49(January 2012), pp. 21-30.

- Gao, F.; Stead, D. (2014). *The application of a modified Voronoi logic to brittle fracture modelling at the laboratory and field scale*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, vol. 68(June 2014), pp. 1-14.
- Ghazvinian, E.; Diederichs, M.; Quey, R. (2014). *3D Random Voronoi grain-based models for simulation of brittle rock damage and fabric-guided micro-fracturing*. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, vol. 6(6), pp. 506-521.
- Hamdi, P.; Stead, D.; Elmo, D. (2014). *Damage characterization during laboratory strength testing: A 3D-finite-discrete element approach*. Computers and Geotechnics, vol. 60(July 2014), pp. 33-46.
- Itasca Consulting Group, Inc., (2005). *PFC3D Particle Flow Code in Three Dimensions*, Version 3.1, Minneapolis, ICG.
- Kazerani, T.; Zhao, J. (2010). *Micromechanical parameters in bonded particle method for modelling of brittle material failure*. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, vol. 34(18), pp. 1877-1895.
- Kazerani, T. (2011). *Micromechanical study of rock fracture and fragmentation under dynamic loads using discrete element method*. PhD Thesis. École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland.
- Klanphumesri, S. (2010). *Direct tension tests of rock specimens*. MSc Thesis. Surarane University of Technology, Thailand.
- Lan, H.; Martin, C.; Hu, B. (2010). *Effect of heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behaviour during compression loading*. Journal of Geophysical Research, vol. 115(B1), pp. 1-14.
- Martin C.; Chandler N. (1994). *The progressive fracture of Lac du Bonnet granite*. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, vol. 31(6), pp. 643-659.
- Meguro, K.; Iwashita, K. e Hakuno, M. (1991). *Fracture analyses of media composed of irregularly shaped regions by the extended distinct element method*. Structural Engineering / Earthquake Engineering, JSCE, vol. 8(3), pp. 37-48.
- Okabe, A.; Boots, B.; Sugihara, K. (1992). *Spatial tessellations: Concepts and applications of Voronoi diagrams*, John Wiley & Sons.
- Potyondy, D.; Cundall, P.; Lee, C. (1996). *Modelling rock using bonded assemblies of circular particles*. In: Aubertin M *et al.* (eds) Proceedings of the 2nd North American Rock Mechanics Symposium, Montreal, Quebec, Canada, 19-21 June 1996. Rotterdam, Balkema, pp. 1937-1944.
- Potyondy, D.; Cundall, P. (2004). *A bonded-particle model for rock*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, vol. 41(8), pp. 1329-1364.
- Potyondy, D. (2010). *A grain based model for rock: approaching the true microstructure*. In: Li C, *et al.* (eds) Proceedings of Berg Mekanikk i Norden 2010 - Rock Mechanics in the Nordic Countries, Kongsberg, Norway, 9-12 June 2010. Norwegian Group for Rock Mechanics, pp. 225-234.
- Rokugo, K. (1989). *Testing method to determine tensile softening curve and fracture energy of concrete*. Fracture toughness and fracture energy, pp. 153-163. Balkema.
- Schlangen, E.; Garboczi, E. (1997). *Fracture simulations of concrete using lattice models: Computational aspects*. Engineering Fracture Mechanics, vol. 57(2/3), pp. 319-332.

- Scholtès, L.; Donzé, F.V. (2013). *A DEM model for soft and hard rocks: Role of grain interlocking on strength*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 61(2), pp. 352-369.
- Underwood, P. (1983). *Dynamic relaxation*. In Belytschko T. and Hughes T. (eds) Computation Methods for Transient Analysis, North-Holland, New York, pp. 246-265.
- Wang, Y.; 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.