

UM MODELO DISCRETO DE PARTÍCULAS 2D PARA SIMULAÇÃO DA FRATURA EM ROCHA: FORMULAÇÃO E CALIBRAÇÃO

A 2D discrete particle model for rock fracture: formulation and calibration

Nuno Monteiro Azevedo*

Fátima Gouveia**

RESUMO – Modelos detalhados de partículas têm sido adotados na modelação da fratura em materiais quase-frágeis. Neste artigo é adotado um modelo de partículas 2D que tem sido desenvolvido tendo em vista o estudo da fratura em rocha. Os sistemas de partículas são gerados com base num algoritmo de geração de partículas poligonais baseado nos Voronois de Laguerre da triangulação de Delaunay dos centros de gravidade das partículas circulares. O modelo de partículas poligonais, aproximado através de partículas circulares que interagem entre si através de um esquema de contacto múltiplo, é validado em ensaios biaxiais, e em ensaios do tipo Brasileiro, em rocha. São apresentados vários estudos paramétricos que permitem identificar a influência dos parâmetros micromecânicos nas propriedades macroscópicas, elásticas e resistentes. É por fim analisada a relevância de um modelo de contacto com leis de enfraquecimento bilinear em tração e corte de modo a obter valores coerentes de tração última nos ensaios diretos e nos ensaios Brasileiros.

ABSTRACT – Detailed rigid particle models have been proposed for modelling fracture in quasi-brittle materials. In the present study, a 2D rigid particle model that has been developed to study fracture phenomena in rock is adopted. The particle assemblies are created using a particle generation algorithm that generates polygonal shaped particles based on the Laguerre Voronois of the circular particle gravity centres of an initial circular particle assembly. The particles are considered to interact through a multiple contact point model where the contact width and the contact location are defined given the Voronoi tessellation. The particle model is validated against known triaxial and Brazilian test results of a granite rock. Several parametric studies are presented showing the influence of the elastic and strength micromechanical parameters on both the macroscopic elastic and strength properties. Finally, a reference is 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 de partículas, fratura em rocha, estudos paramétricos.

1 – INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos Discretos, MED, tendo por base uma idealização de meio descontínuo, foi inicialmente desenvolvido para a análise da estabilidade de maciços rochosos diaclasados, modelos de blocos (Cundall, 1971), tendo sido posteriormente adaptado ao estudo do comportamento mecânico de materiais granulares, modelos de partículas, (Cundall e Strack, 1979).

O MED, blocos ou partículas, baseia-se num esquema numérico explícito, que recorre a leis de interação simples para determinar as forças nos contactos, incluindo algoritmos de deteção e atualização dos contactos. Dadas as forças aplicadas em cada bloco/partícula, a 2ª lei do movimento

* Investigador Auxiliar, Departamento de Barragens de Betão, LNEC E-mail: nazevedo@lnec.pt

** Engenheira Civil, Bolseira de Investigação, Departamento de Barragens de Betão, LNEC.

de Newton é utilizada de modo a definir a nova posição de cada bloco/partícula. A potencialidade desta técnica de modelação na análise de problemas geomecânicos, os principais tópicos de formulação e implementação associados ao MED e novas perspetivas de aplicação são analisadas em Lemos (2004).

No modelo proposto por Cundall e Strack (1979) o material granular é simulado como um conjunto de discos ou esferas rígidas, que interagem entre si através de contactos pontuais, dotados de rigidez nas direções normal e transversal. 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) e Wang e Tonon (2009).

Os modelos MP, ao terem em conta a estrutura granular e a heterogeneidade do material, incluem uma dimensão 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), 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 consegue modelar a envolvente de rotura triaxial de uma rocha granítica do tipo Lac du Bonnet. 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 2D que tem sido desenvolvido tendo em vista o estudo da fratura em rocha VGCM-2D Azevedo e Lemos (2011). Os sistemas de partículas são gerados com base num algoritmo de geração de partículas poligonais baseado na tesselação de Voronois de Laguerre, Okabe *et al.* (1992), dos centros de gravidade das partículas circulares previamente inseridas. O modelo de partículas poligonais é aproximado através de partículas circulares que interagem entre si através de um esquema de contacto múltiplo, sendo a localização e a altura do 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 VGCM-2D e analisa-se a sua influência no comportamento macroscópico do material, nomeadamente na resistência à compressão e à tração, atrito interno e coesão. Os micro-parâmetros analisados incluem a rigidez normal e tangencial do contacto, o coeficiente de atrito do contacto entre partículas e a resistência à tração e ao corte do contacto. Dada a incoerência identificada nos valores de resistência à tração obtidas em ensaios diretos e em ensaios do tipo

Brasileiro com um modelo frágil, apresentam-se também os valores obtidos com base num modelo de contacto com leis de enfraquecimento bilineares da resistência última do contacto à tração e do termo coesivo do contacto.

A calibração do modelo foi realizada com base em resultados de ensaios experimentais de compressão triaxial e ensaios do tipo Brasileiro, executados em amostras de granito Augig, 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 comercial Itasca-UDEC (2004).

2 – FORMULAÇÃO

No MED a solução numérica é obtida através da aplicação da segunda lei de Newton para o cálculo da posição da partícula e de leis força-deslocamento para determinar as forças no contacto. As forças são obtidas por integração das equações do movimento, de forma explícita, com base no método das diferenças centrais.

A lei do movimento é dada pelas seguintes equações:

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

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

nas quais, F_i 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 $\dot{\omega}_i$ à aceleração angular da partícula. A força e o momento resultantes do amortecimento local são determinados através das seguintes expressões:

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

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

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

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

Este tipo de amortecimento, inicialmente proposto por Cundall (1987), 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).

2.1 – Modelo de contacto VGCM-2D

O modelo de contacto VGCM-2D baseia-se no modelo GCM, *generalized contact model*, Azevedo e Lemos (2005), que permite a transmissão de forças e momentos entre partículas através de um ou mais pontos de contacto. Os pontos de contacto locais são dispostos ao longo do plano

de contacto, de forma simétrica relativamente a um ponto de referência, Fig. 1. O número de pontos locais adotados na discretização do contacto é um parâmetro do modelo.

Ao contrário do modelo de contacto pontual tradicional, PCM, que apenas permite a transmissão de forças através do contacto, o modelo adotado tem a capacidade de transmitir momentos, o que possibilita respostas dos sistemas de partículas mais próximas das obtidas experimentalmente em materiais coesivos, Azevedo e Lemos (2005).

A particularidade do modelo utilizado está associada ao facto de a altura e posição do contacto ser definida a partir de uma tesselação de Voronoi de Laguerre, Fig. 5 b). Esta solução permite obter um maior número de ligações entre cada partícula, quando comparado com os modelos tradicionais de partículas circulares, Potyondy e Cundall (2004) e Diederichs (2000).

Modelos com partículas poligonais, Potyondy (2010), Kazerani e Zhao (2010) e Lan *et al.* (2010), têm conduzido a resultados mais próximos dos obtidos experimentalmente em rocha, nomeadamente na relação entre a resistência à tração e à compressão. Apesar de o modelo VGCM-2D estar associado a partículas circulares, o tipo de contacto adotado, antes de ocorrer a rotura do mesmo, constitui uma aproximação do contacto tipo aresta-aresta implementado nos modelos de partículas poligonais, com a vantagem de ser computacionalmente menos exigente.

2.1.1 – Relação força-deslocamento

O vetor normal unitário à superfície de contacto é determinado recorrendo à posição do centro de gravidade das partículas, x_i , e à distância entre elas, d , de acordo com a seguinte expressão, ver Fig. 1:

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

A sobreposição entre partículas no ponto de contacto de referência, $U_n^{[0]}$, é obtida através da seguinte expressão, ver Fig. 1:

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

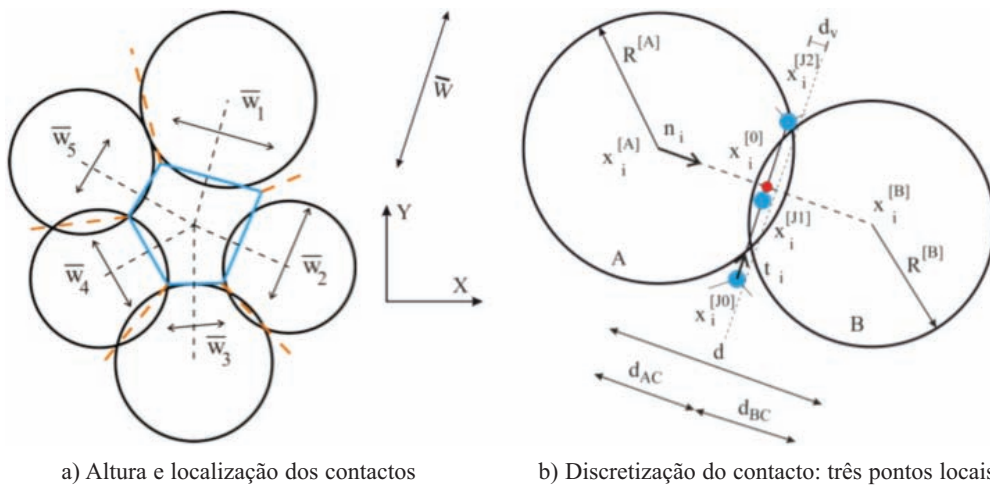


Fig. 1 – Modelo de contacto VGCM-2D.

Os pontos de contacto locais encontram-se dispostos ao longo da superfície de contacto de forma simétrica. Tendo em conta que a localização do plano de contacto é definida pela tesselação de Voronoi de Laguerre, é necessário recorrer a um fator, d_v , para realizar a translação do plano de contacto definido geometricamente, para o novo plano de contacto:

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

A posição de cada um dos pontos locais, $x_i^{[J]}$, é definida relativamente à posição do ponto de contacto de referência, recorrendo ao vetor unitário tangente ao plano de contacto, t_i , e à altura relativa do mesmo, $W^{[J]}$:

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

A velocidade do ponto de contacto local, $\dot{x}_i^{[J]}$, é considerada constante durante o passo de cálculo e corresponde à diferença entre as velocidades associadas às partículas A e B, nesse mesmo ponto:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i^{[J]} &= (\dot{x}_i^{[J]})_B - (\dot{x}_i^{[J]})_A \\ &= (\dot{x}_i^B + \varepsilon_{i3k} \omega_3^B (\dot{x}_i^{[J]} - \dot{x}_i^B)) - (\dot{x}_i^A + \varepsilon_{i3k} \omega_3^A (\dot{x}_i^{[J]} - \dot{x}_i^A)) \end{aligned} \quad (10)$$

em que, ε_{i3k} é o símbolo de permutação. O incremento de deslocamento de cada ponto de contacto local, associado ao intervalo Δt , nas componentes normal, $\Delta x_n^{[J]}$, e de corte, $\Delta x_{s,i}^{[J]}$, é determinado através das seguintes expressões:

$$\Delta x_n^{[J]} = (\dot{x}_i^{[J]} \Delta t) n_i \quad (11)$$

$$\Delta x_{s,i}^{[J]} = (\dot{x}_i^{[J]} \Delta t) - \Delta x_n^{[J]} n_i \quad (12)$$

Nesta formulação, a componente normal do deslocamento do ponto de contacto local corresponde a uma grandeza escalar e a componente tangencial, a uma grandeza vetorial. A atualização da sobreposição entre partículas, no ponto de contacto local, é realizada de forma incremental recorrendo à velocidade do contacto, no intervalo Δt :

$$U_n^{[J]} = U_{n,\text{anterior}}^{[J]} + (\dot{x}_i^{[J]} n_i) \Delta t \quad (13)$$

Os incrementos de força normal, $\Delta F_n^{[J]}$, e de corte, $\Delta F_{s,i}^{[J]}$, em cada ponto de contacto local, são determinados de acordo com uma relação força-deslocamento linear. A rigidez normal, $k_n^{[J]}$ e de corte, $k_s^{[J]}$, apresentadas na expressão seguinte, estão associadas ao contacto local:

$$\Delta F_n^{[J]} = -k_n^{[J]} \Delta x_n^{[J]} \quad (14)$$

$$\Delta F_{s,i}^{[J]} = -k_s^{[J]} \Delta x_s^{[J]} \quad (15)$$

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

$$F_n^{[J]} = F_{n,anterior}^{[J]} + \Delta F_n^{[J]} \quad (16)$$

$$F_{s,i}^{[J]} = F_{s,i,anterior}^{[J]} - \varepsilon_{ik3} \varepsilon_{3mn} F_{s,k,anterior}^{[J]} n_m n_n + \Delta F_{s,i}^{[J]} \quad (17)$$

Dado que a força de corte é armazenada na forma vetorial, no sistema de coordenadas globais, é necessário proceder à correção da direção da força de corte anterior, tendo em conta o novo plano de contacto, associado ao passo de cálculo atual.

Após a atualização das forças normal e de corte exercidas em cada ponto de contacto local são verificadas as condições impostas no modelo constitutivo associado ao contacto. Caso as condições intrínsecas ao modelo adotado não sejam satisfeitas, é realizado um ajuste destas forças.

A força resultante exercida sobre cada ponto de contacto local, $k^{[J]}$, é calculada através da seguinte expressão:

$$F^{[J]} = F_n^{[J]} n_i + F_{s,i}^{[J]} \quad (18)$$

As forças, $F_i^{[C]}$, e o momento, $M_3^{[C]}$, 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:

$$F_i^{[C]} = \sum_j F_i^{[J]} \quad (19)$$

$$M_3^{[C]} = - \sum_j F_n^{[J]} W^{[J]} \quad (20)$$

Após o cálculo das forças e do momento exercidos sobre o ponto de contacto de referência, procede-se à transferência dos mesmos para as partículas, de acordo com as seguintes expressões:

$$F_i^{[A]} = F_i^{[A]} - F_i^{[C]} \quad (21)$$

$$F_i^{[B]} = F_i^{[B]} + F_i^{[C]} \quad (22)$$

$$M_3^{[A]} = M_3^{[A]} - \varepsilon_{3jk} (x_j^0 - x_j^{[A]}) F_k^{[C]} - M_3^{[C]} \quad (23)$$

$$M_3^{[B]} = M_3^{[B]} - \varepsilon_{3jk} (x_j^0 - x_j^{[B]}) F_k^{[C]} - M_3^{[C]} \quad (24)$$

Em cada passo de cálculo, conhecidas as forças exercidas no centro de gravidade das partículas aplica-se a segunda lei de Newton, e com base no método das diferenças centrais atualizam-se as velocidades e os deslocamentos de cada partícula. Por fim procede-se à atualização dos contactos.

Caso se pretenda obter apenas a solução estática, é possível recorrer à técnica de escalar as massas, Underwood (1983), o que permite aumentar a taxa de convergência do algoritmo através da redução da relação entre as frequências mínima e máxima do sistema. Neste caso, a massa e a

inércia dos elementos discretos são alteradas em cada passo de cálculo, de forma a garantir estabilidade do algoritmo para um incremento de tempo unitário. A massa e inércia normalizadas são determinadas através das seguintes expressões:

$$m_{\text{scaled}} = 0,25 K_t \quad (25)$$

$$I_{\text{scaled}} = 0,25 K_\theta \quad (26)$$

As rigidezes de translação, K_t , e de rotação das partículas, K_θ , têm de ter em conta a contribuição de todas as partículas em contacto com a mesma, em cada passo de cálculo. Os seus valores máximos, não tendo em consideração a orientação do plano de contacto, podem ser determinados através das seguintes expressões:

$$K_t = \sum_{c=1}^N 2 \left(\sum_J k_n^{[J]} + \sum_J k_s^{[J]} \right) \quad (27)$$

$$K_\theta = \sum_{c=1}^N \left[\sum_J k_s^{[J]} (d_{AC}^2 + d_{AC} d_{BC}) + 2 \sum_J k_n^{[J]} (W^{[J]})^2 \right] \quad (28)$$

correspondendo: $d_{AC} = \|x_i^{[A]} - x_i^{[0]}\|$ e $d_{BC} = \|x_i^{[B]} - x_i^{[0]}\|$ à distância entre o centro de gravidade das partículas A e B e o plano de contacto.

2.2 – Rigidez e resistência do contacto

A rigidez total do contacto, nas direções normal e tangencial, é dada pelas seguintes expressões:

$$K_n = \sum_J k_n^{[J]} = A_c \bar{k}_n = A_c \frac{\bar{E}}{d} \quad (29)$$

$$K_s = \sum_J k_s^{[J]} = \eta K_n \quad (30)$$

em que, \bar{E} é o módulo de elasticidade do material contínuo equivalente; d é a distância entre o centro de gravidade das partículas em contacto; $A_c = \bar{W}t$ é a área do contacto; \bar{W} é a altura total do contacto; t é a espessura do sistema de partículas e η é o fator que relaciona a rigidez de corte e normal do contacto.

A resistência total do contacto à tração, $F_{n,\text{max}}$, e a força de coesão máxima, C_{max} , são dadas em função das tensões máximas de tração, $\sigma_{n,c}$, e da tensão máxima de coesão, τ_c , admitidas nos contactos, e pela área do contacto, de acordo com as seguintes expressões:

$$F_{n,\text{max}} = \sigma_{n,c} A_c \quad (31)$$

$$C_{\text{max}} = \tau_c A_c \quad (32)$$

A rigidez e a resistência de cada ponto local, adotado na discretização do contacto, são definidas com base no peso do ponto de contacto local e no valor total da grandeza associada ao

contacto. Para discretizações do contacto com um número de pontos inferior a 6 pontos locais, os pesos de cada ponto são os pesos associados a uma integração de Lobatto. Desta forma, para discretizações superiores a 3 pontos locais, garante-se a mesma rigidez de rotação global que a obtida no modelo de contacto pontual com mola rotacional, Potyondy e Cundall (2004). Para discretizações superiores a 6 pontos locais, o mesmo peso é adotado em todos os pontos.

Nos resultados numéricos a seguir apresentados foram adotados dois modelos para a relação constitutiva do contacto. Num primeiro modelo, modelo frágil, adotou-se um critério de rotura de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite, Figuras 2 e 3, e num segundo modelo, modelo com enfraquecimento, adotaram-se leis de enfraquecimento, *softening*, bilineares à tração e à coesão, Fig. 4.

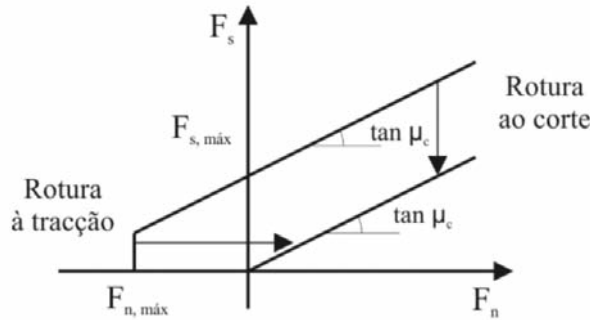


Fig. 2 – Modelo constitutivo de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite.

No modelo frágil, a força de contacto na direção normal segue uma lei força-deslocamento linear, sendo a força de tração limitada pela resistência à tração do contacto, Fig. 3. Na direção tangencial, a força máxima admissível é caracterizada pela força normal, F_n , pelo coeficiente de atrito, μ_c , e pela coesão máxima, C_{\max} , de acordo com a seguinte expressão:

$$F_{s,\max} = C_{\max} + F_n \mu_c \quad (33)$$

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, F_n .

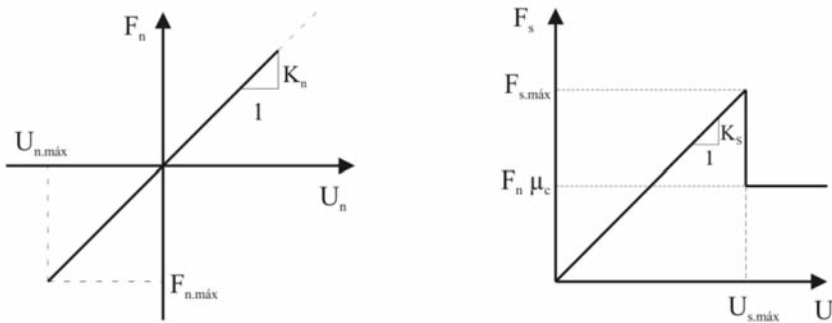


Fig. 3 – Modelo constitutivo de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite: relação entre a força e o deslocamento relativo entre partículas, nas direções normal e tangencial.

No modelo com enfraquecimento a resistência é reduzida de forma gradual após ser atingida a força máxima admissível. A Fig. 4 apresenta o modelo com enfraquecimento, admitindo uma relação linear e uma relação bilinear da força-deslocamento proposta por Rokugo (1989), após se atingir os valores de pico. Note-se que a área sob o gráfico corresponde à energia de fratura, G_f , do contacto na direção em análise. Comparando os diagramas associados à relação linear e bilinear, verifica-se que neste último, o processo de propagação das fendas ocorre de forma mais suave e controlada, pois o deslocamento relativo entre partículas que conduz à rotura do contacto, U_f , é superior, conferindo maior ductilidade ao material.

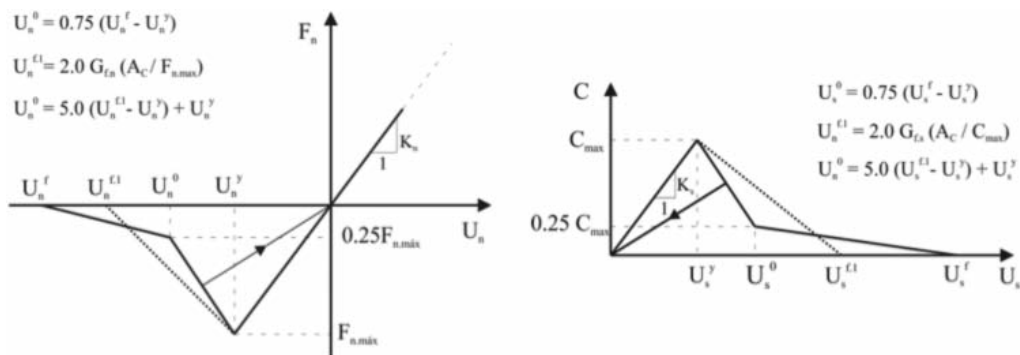


Fig. 4 – Modelo constitutivo com enfraquecimento à tração e ao corte no termo coesivo.

No modelo de enfraquecimento bilinear, os valores da força máxima de tração e da coesão máxima são reduzidos com base no valor de dano do contacto, que varia entre 0, sem dano, e 1, o contacto é considerado fendilhado só funcionando em atrito puro. O valor do dano do contacto em tração e no termo coesivo é definido com base no deslocamento atual do contacto e na lei de enfraquecimento do contacto. O dano do contacto é obtido através da soma das duas parcelas de dano. A força de corte máxima é definida a partir da equação (33) em função do valor de coesão dado pela lei de enfraquecimento.

As condições impostas no modelo constitutivo adotado são verificadas para cada ponto local. Caso se verifique a rotura de todos os pontos locais, o comportamento do contacto segue o modelo de contacto pontual tradicional, PCM, funcionando o contacto somente sob forças de compressão com um termo de atrito.

2.3 – Parâmetros do modelo

Nos modelos de partículas, as propriedades são definidas de forma a se obter um sistema de partículas com comportamento mecânico semelhante ao da rocha a simular. O modelo VGCM-2D requer a definição de propriedades físicas associadas aos contactos e às partículas. As propriedades associadas aos contactos correspondem à resistência à tração, $\sigma_{n,c}$, à coesão, τ_c , ao coeficiente de atrito do contacto, μ_c , à relação entre a rigidez de corte e a rigidez normal, η , ao módulo de elasticidade do material contínuo equivalente, \bar{E} , e ao número de pontos locais adotados na discretização do contacto.

As propriedades associadas aos sistemas de partículas correspondem ao diâmetro máximo, D_{\max} , e ao diâmetro mínimo, D_{\min} , das partículas, à sua distribuição, à porosidade do sistema de partículas e à densidade das partículas, ρ . É de salientar que a distribuição da dimensão adotada para as partículas deverá ser o mais próximo possível da constituição granular da rocha que se pretende modelar.

2.4 – Geração do sistema de partículas

No modelo de elementos discretos apresentado, a rocha a analisar é discretizada num conjunto de partículas que interagem entre si através de interfaces poligonais. A geração do sistema de partículas envolve duas fases distintas, nomeadamente, a geração de um sistema de partículas circular inicial e a definição dos planos de contacto através da tesselação de Voronoi de Laguerre, Okabe *et al.* (1992).

Na construção da estrutura de Voronoi de Laguerre, a distância entre um ponto no espaço e o centro de gravidade da partícula é dada em função da distância Euclideana e do quadrado do raio da partícula. Com esta métrica, os planos de contacto da estrutura de Voronoi Laguerre são muito próximos dos planos de contacto quando se considera apenas as partículas perfeitamente circulares. Caso se adotasse somente a estrutura de Voronoi com a métrica Euclideana, os planos de contacto localizar-se-iam a meia distância entre os centros de cada partícula perdendo-se a informação granulométrica introduzida no modelo.

Dados o diâmetro mínimo e máximo das partículas que irão constituir o sistema e a porosidade final desejada, as partículas são criadas e introduzidas na área definida segundo uma distribuição uniforme, com metade do seu raio para evitar a sobreposição entre elementos. Depois de inseridas, as partículas retomam o seu diâmetro final conduzindo a um rearranjo dos elementos. A nova posição das partículas é obtida com base na aplicação do modelo VGCM-2D, considerando atrito nulo entre as partículas e adotando um único ponto na discretização do contacto.

A geometria dos contactos, a localização, a posição e a altura, é obtida através da tesselação de Voronoi de Laguerre, Okabe *et al.* (1992), realizada a partir da triangulação de Delaunay-Laguerre dos centros de gravidade das partículas. A configuração final do sistema de partículas e geometria dos contactos são apresentadas na Fig. 5, ensaios biaxiais, e Fig. 6, ensaios do tipo Brasileiro.

3 – ENSAIOS DE COMPRESSÃO BIAxIAL E BRASILEIRO

O modelo numérico apresentado foi adotado na simulação de ensaios biaxiais e ensaios do tipo Brasileiro, para posterior realização de um estudo paramétrico que visa facilitar o processo de calibração do modelo e avaliar a adequabilidade do mesmo à representação do comportamento da rocha em análise.

Os ensaios biaxiais, Fig. 5, foram realizados em amostras com 80mm de largura e 160mm de altura, constituídas por 1680 discos de diâmetro compreendido entre 2.0mm e 4.0mm, correspondendo a uma porosidade de 10%. O valor adotado para o diâmetro dos discos é próximo da dimensão dos grãos que constituem o granito Augig a simular, 2 a 6 mm, Kazerani (2011). A simulação foi realizada em duas dimensões, admitindo para o sistema de partículas uma espessura de 80 mm.

Neste tipo de ensaios, o sistema de partículas é posicionado entre duas placas, sendo solicitado através do deslocamento vertical da placa superior, a uma velocidade de 6.25×10^{-7} mm/s a que corresponde uma velocidade de deformação de 3.91×10^{-8} por passo de cálculo. O confinamento da amostra é conferido através das paredes laterais, constituídas por vários elementos independentes que apenas poderão apresentar deslocamento na direção horizontal, de forma a simular a membrana flexível. Nos ensaios realizados apenas foi permitida a transmissão de forças na direção normal entre as paredes e as partículas circulares, assumindo-se que nos ensaios em rocha adotados para comparação, o atrito entre as placas e a rocha é desprezável.

Os ensaios de compressão diametral ou ensaios do tipo brasileiro, Fig. 6, foram realizados em amostras com 80mm de diâmetro e igual espessura, constituídas por 640 partículas de dimensões idênticas às adotadas nos ensaios biaxiais. A espessura do disco foi definida de forma a reduzir os efeitos associados à geometria da amostra. Segundo Fahimifar e Malekpour (2012), a resistência à tração obtida em ensaios de compressão diametral é mais próxima à resistência real quando a amostra apresenta uma razão geométrica (espessura/diâmetro) unitária.

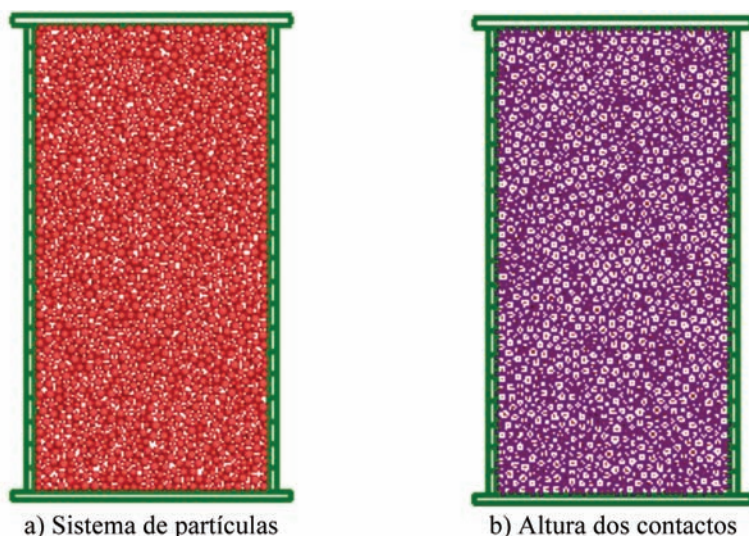


Fig. 5 – Modelo de elementos discretos VGCM-2D, para simulação de ensaios biaxiais.

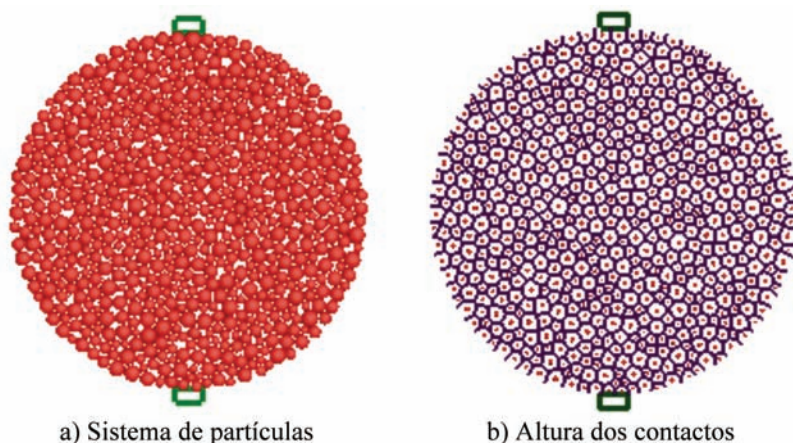


Fig. 6 – Modelo de elementos discretos VGCM-2D, para simulação de ensaios de compressão diametral.

As condições quase-estáticas foram garantidas em ambos os ensaios, através da adoção de um coeficiente de amortecimento local elevado, $\alpha = 0.70$ e da aplicação de uma taxa de deformação baixa. Caso as simulações não fossem realizadas sob estas condições, ocorreria uma grande oscilação no valor das forças associadas aos contactos, conduzindo à sobrestimação da resistência do material sintético, Cundall e Strack (1979). O valor da velocidade da placa atuante adotado em ambos os ensaios, 6.25×10^{-7} mm/s, foi definido após a realização de vários testes, nos quais foi adotada uma velocidade cada vez menor, até ser verificada a convergência dos resultados.

Dada a aleatoriedade associada ao processo de geração, foram testados quatro sistemas de partículas diferentes, sendo apenas apresentados os valores médios. A resistência à tração indicada nas envolventes de rotura, obtidas nos vários ensaios numéricos realizados, corresponde à tensão máxima registada no ensaio de tração direta.

3.1 – Estudo paramétrico

Tal como referido, nos modelos de partículas as propriedades são definidas de forma a reproduzir o comportamento do material a nível macroscópico. Como consequência da inexistência de relação direta entre as propriedades do modelo e as propriedades do material a simular, o processo de calibração poderá ser relativamente moroso.

O estudo paramétrico apresentado teve como principal objetivo a caracterização dos parâmetros introduzidos no modelo e análise da sua influência no comportamento do material sintético, nomeadamente na resistência de pico, à compressão e à tração, na coesão, c , e no ângulo de atrito interno, φ .

As micro-propriedades analisadas correspondem a parâmetros de deformabilidade e resistência. Como parâmetros de deformabilidade tem-se o módulo de elasticidade do material contínuo equivalente, \bar{E} , e o fator que relaciona a rigidez de corte e normal do contacto, η . Como parâmetros de resistência do modelo frágil, tem-se o coeficiente de atrito, μ_c , a resistência à tração, $\sigma_{n,c}$, e a resistência ao corte, τ_c , do contacto.

A influência da discretização do contacto foi também analisada, bem como o efeito da adoção de um critério de rotura do contacto com leis de enfraquecimento. No caso do modelo de contacto com leis de enfraquecimento é necessário considerar, para além dos parâmetros resistentes associados ao modelo frágil, a energia de fratura à tração, $G_{f,n}$, e a energia de fratura ao corte, $G_{f,c}$.

3.1.1 – Parâmetros de deformabilidade

Os parâmetros de deformabilidade do modelo correspondem ao módulo de elasticidade do material contínuo equivalente, \bar{E} , e à relação entre a rigidez de corte e a rigidez normal do contacto, η . Estes são calibrados de modo a se obter os valores macroscópicos do módulo de elasticidade, E , e do coeficiente de Poisson, ν , da rocha a simular.

Para analisar a influência de ambos os parâmetros determinou-se o módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson do material para três valores de \bar{E} diferentes, $0.5 \bar{E}_R$, $1.0 \bar{E}_R$ e $2.0 \bar{E}_R$, com $\bar{E}_R = 33.4 \times 10^6$ kPa variando para cada um deles a razão entre a rigidez de corte e normal do contacto, Fig. 7.

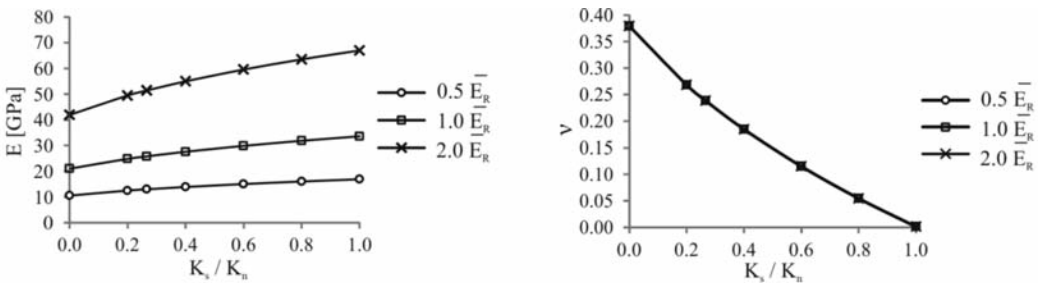


Fig. 7 – Influência dos parâmetros de deformabilidade do modelo nas propriedades elásticas do material.

Da análise da Fig. 7, verifica-se que o módulo de elasticidade macroscópico do sistema de partículas depende de ambos os micro-parâmetros elásticos, sendo mais sensível à variação da relação de rigidez K_s/K_n para valores de \bar{E} mais elevados.

Tal como verificado por Diederichs (2000) e Potyondy e Cundall (2004), o coeficiente de Poisson é condicionado principalmente pela relação K_s/K_n , apresentando valores mais elevados para relações de rigidez K_s/K_n mais baixas. Admitindo que os sistemas de partículas com o mesmo

\bar{E} apresentam a mesma rigidez de contacto na direção normal, conclui-se que uma menor rigidez de corte conduz a uma maior deformação lateral.

A discretização do contacto não tem qualquer influência nos valores obtidos dos parâmetros macroscópicos de elasticidade, desde que os contactos se mantenham em regime elástico.

Para os sistemas de partículas analisados, um valor de \bar{E} igual a 33.4×10^6 kPa e um valor de η igual a 0.27, conduzem a valores macroscópicos do módulo de elasticidade de 25.8 GPa e do coeficiente de Poisson de 0.23, característicos de um granito Augig.

3.1.2 – Discretização do contacto

No modelo VGCM-2D o número de pontos locais adotado na discretização do contacto é um dos parâmetros a considerar. A rigidez e a resistência total do contacto são distribuídas pelos vários pontos locais, de acordo com o especificado em 2.2.

Para analisar a influência do número de pontos locais por plano de contacto realizaram-se diversos ensaios, admitindo as mesmas micro-propriedades, Quadro 1, mas diferentes discretizações do contacto, ou seja, admitindo 1, 2, 3, 6, 12 e 20 pontos locais.

Quadro 1 – Micro-propriedades utilizadas no estudo paramétrico.

\bar{E} [kPa]	η	μ_c	$\sigma_{n,c}$ [MPa]	τ_c [MPa]
33.4×10^6	0.27	0.40	23.5	47.0

As propriedades resistentes obtidas nos ensaios referidos, nomeadamente a resistência à compressão uniaxial, σ_c , a resistência à tração uniaxial, σ_t , a resistência à tração medida em ensaios de compressão diametral, $\sigma_{c,ind}$, a coesão, c , e o ângulo de atrito, ϕ , são apresentadas no Quadro 2. São ainda indicadas a rigidez normal, K_n e de corte, K_s , do contacto, bem como a rigidez de rotação do mesmo, K_θ para cada discretização. É ainda definido um parâmetro que relaciona a inclinação da envolvente de rotura entre 0 MPa e 2 MPa e entre 2 MPa e 4 MPa, d_{0-2}/d_{2-4} .

Da análise do Quadro 2 verifica-se que a resistência à tração do material, obtida em ensaios de tração uniaxial e de compressão diametral, não apresentou uma variação relevante com o número de pontos locais adotados, pois a rigidez de rotação entre partículas, K_θ , é relativamente pouco influente neste tipo de ensaios. O mesmo não se verifica para a resistência à compressão, que é claramente superior nos modelos com maior rigidez de rotação dos contactos.

De acordo com os resultados apresentados no Quadro 2, a rigidez de rotação obtida no modelo VGCM 2D 2LP é consideravelmente superior à registada nos modelos com mais pontos locais. Tal como referido em 2.2, a rigidez total do contacto é distribuída pelos vários pontos locais de forma a obter a mesma rigidez rotacional que um contacto pontual com mola rotacional, para discretizações com menos de 6 pontos locais. No entanto num modelo com apenas dois pontos de contacto, não é possível obter a mesma rigidez rotacional.

Da Fig. 8 verifica-se que a resistência de pico obtida com o modelo equivalente ao modelo de contacto pontual tradicional, VGCM-2D 1LP, foi mais baixa, devido à incapacidade de transmitir momentos através do plano de contacto e consequentemente permitir maiores rotações entre partículas durante o processo de fendilhação. Esta redução é mais evidente no ensaio de compressão uniaxial, devido à ausência de confinamento lateral que confere alguma resistência adicional à rotação e deslizamento entre partículas. Como consequência da ausência de rigidez de rotação, a razão entre a resistência à compressão e à tração direta do material sintético, σ_c/σ_t , é menor devido à redução da tensão de pico obtida no ensaio de compressão uniaxial. Pelo mesmo motivo, o quociente d_{0-2}/d_{2-4} , é muito superior no caso do modelo com contacto pontual.

Quadro 2 – Resultados obtidos nos modelos com diferente discretização dos contactos.

	VGCM-2D 1LP	VGCM-2D 2LP	VGCM-2D 3LP	VGCM-2D 6LP	VGCM-2D 12LP	VGCM-2D 20LP
σ_c [MPa]	91.1	118.59	117.3	107.7	105.6	104.9
ϕ [°]	42.6	42.1	42.9	43.3	42.9	43.5
c [MPa]	20.0	26.3	25.6	23.2	23.0	22.5
$\sigma_{t,dir}$ [MPa]	14.98	14.84	13.87	13.57	13.90	13.79
$\sigma_{t,ind}$ [MPa]	10.04	9.35	9.20	8.21	7.93	7.92
σ_c / σ_t	6.08	7.99	8.46	7.94	7.60	7.61
d_{0-2} / d_{2-4}	2.38	1.32	1.28	0.99	1.10	1.07
$\sigma_{t,dir} / \sigma_{t,ind}$	1.49	1.59	1.51	1.65	1.75	1.74
K_n [kN/m]	1.58×10^6	1.58×10^6	1.58×10^6	1.58×10^6	1.58×10^6	1.58×10^6
K_s [kN/m]	4.21×10^5	4.21×10^5	4.21×10^5	4.21×10^5	4.21×10^5	4.21×10^5
K_θ [kN.m/rad]	0.00	1.51	0.526	0.526	0.615	0.577

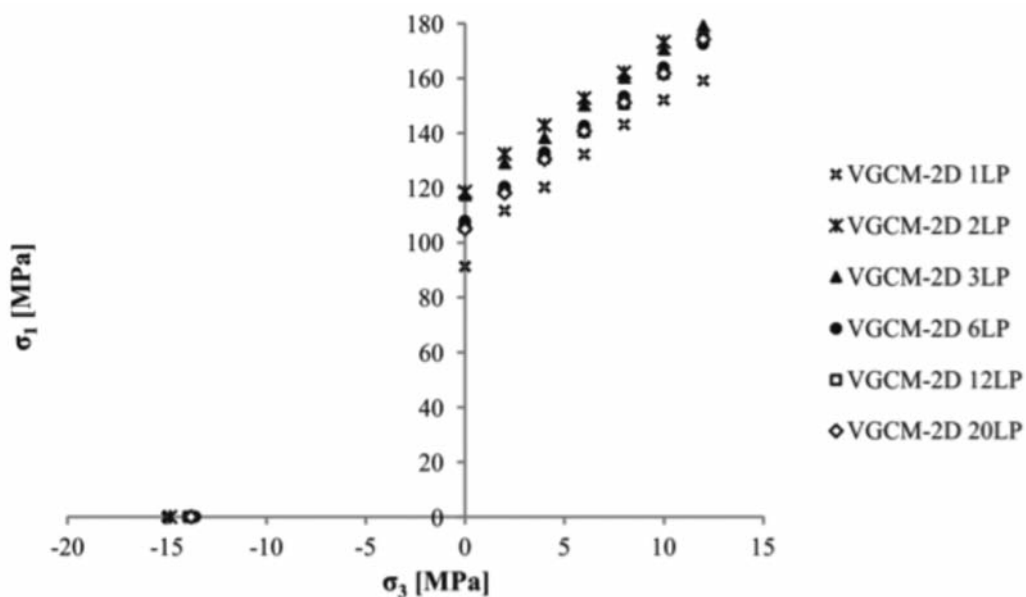


Fig. 8 – Envolventes de rotura obtidas em modelos com diferente discretização dos contactos.

Da Fig. 8 e Quadro 2 é possível concluir que o modelo de contacto com 3 pontos locais apresenta resultados satisfatórios e próximos dos modelos com discretizações superiores, nomeadamente, valores de rigidez de rotação do contacto e valores macroscópicos de resistência. Por este motivo, nos ensaios numéricos que a seguir são analisados adota-se uma discretização com 3 pontos locais.

3.1.3 – Parâmetros de resistência para modelo de contacto frágil

Os parâmetros de resistência do modelo frágil correspondem às propriedades resistentes dos contactos, ou seja, ao coeficiente de atrito, μ_c , à resistência à tração, $\sigma_{n,c}$, e à coesão do contacto, τ_c . Os valores adotados correspondem aos apresentados no Quadro 1, admitindo três pontos locais por plano de contacto, VGCM 2D 3LP, sendo apenas alterado o parâmetro em análise.

3.1.3.1 – Resistência à tração e ao corte do contacto

Para analisar a influência da resistência à tração e ao corte do contacto na resistência do material sintético executaram-se diversas simulações, para quatro relações $\tau_c/\sigma_{n,c}$ diferentes, associadas ao mesmo coeficiente de atrito do contacto, $\mu_c = 0.40$, admitindo numa primeira fase a resistência à tração constante, $\sigma_{n,c} = 23.5$ MPa, e posteriormente uma coesão constante, $\tau_c = 47.0$ MPa.

De acordo com os resultados apresentados na Fig. 9, o aumento da resistência à tração do contacto, $\sigma_{n,c}$, conduz a um significativo aumento da resistência à tração do material, σ_t , e a um ligeiro acréscimo da sua resistência à compressão uniaxial, σ_c , coesão constante, $\tau_c = 47.0$ MPa.

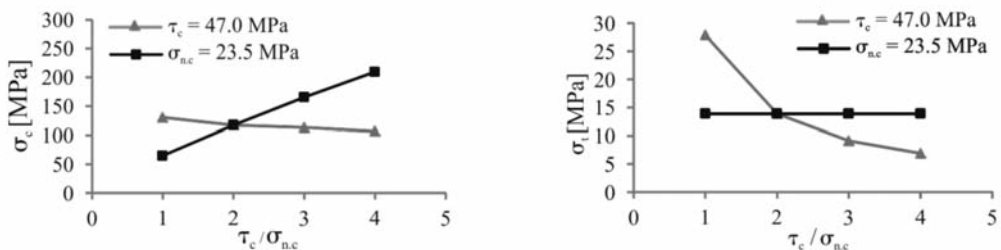


Fig. 9 – Variação da resistência à compressão e à tração do material com a resistência à tração e ao corte do contacto.

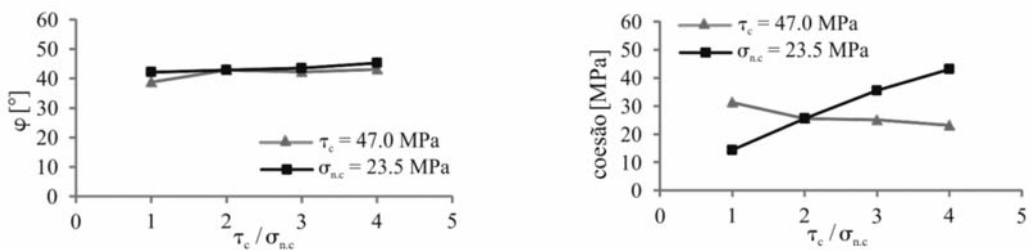


Fig. 10 – Variação do ângulo de atrito e da coesão do material, com a resistência à tração e ao corte do contacto.

A variação do termo coesivo do contacto para valor constante da resistência à tração do contacto, $\sigma_{n,c} = 23.5$ MPa, não exerce influência significativa na resistência à tração do material, mas afeta significativamente a resistência à compressão e a coesão do material, Fig. 10.

O ângulo de atrito do material não demonstrou ser sensível à variação dos parâmetros referidos anteriormente, Fig. 10, quer para resistência à tração constante quer no caso de coesão constante.

Da análise da Fig. 11 verifica-se que a razão entre a resistência à compressão e à tração uniaxial do material é condicionada fundamentalmente pela relação entre a resistência à tração e o termo coesivo do contacto.

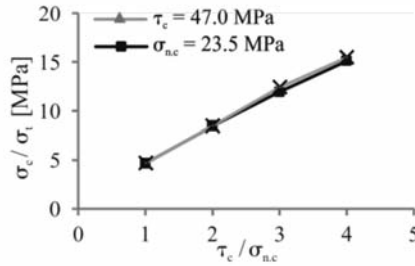


Fig. 11 – Variação da relação σ_c/σ_t com $\tau_c/\sigma_{n.c.}$

Apesar de ser verificada a redução da resistência à compressão do material com a diminuição da resistência à tração do contacto, admitindo termo coesivo constante $\tau_c = 47.0$ MPa, Fig. 9, a diferença entre as tensões de pico dos ensaios de compressão é baixa, Fig. 12 a).

A análise da evolução do processo de fendilhação ao longo destes ensaios, Fig. 12 b), permite verificar que os mecanismos de rotura estão inicialmente associados à rotura por tração dos contactos. O nível de deformação axial em que se iniciam os processos de rotura é tanto maior quanto maior é o valor da resistência à tração do contacto. Constata-se ainda que os mecanismos de rotura ao corte ocorrem para níveis de deformação mais elevados precedendo a rotura do provete.

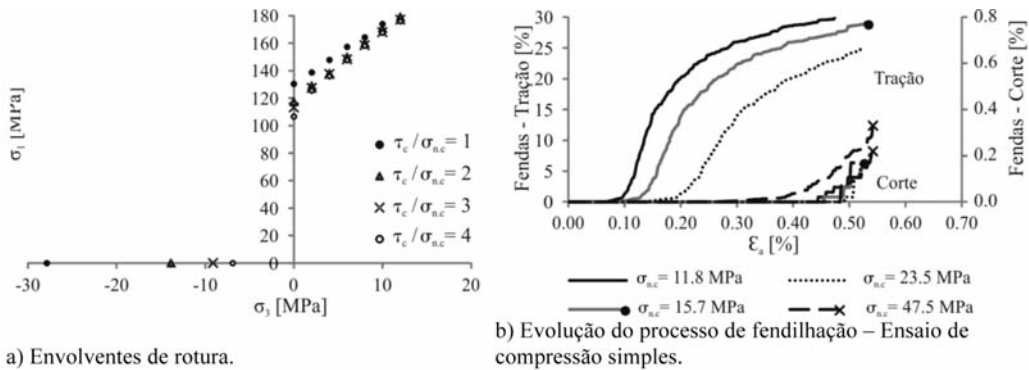


Fig. 12 – Resultados obtidos em modelos com diferente resistência à tração dos contactos: termo coesivo constante.

Da análise da Fig. 13 a) verifica-se que, apesar de o modelo com menor resistência à tração do contacto apresentar um maior número de fendas por tração, estas se encontram distribuídas ao longo da amostra. O mesmo não ocorre no modelo com maior resistência à tração, no qual se verificou uma maior localização de fendas por tração na zona onde se desenvolve posteriormente o plano de rotura, com base na formação de fendas por corte, Fig. 13 b).

Após a execução dos ensaios referidos anteriormente concluiu-se ainda que a razão entre a resistência à compressão e à tração uniaxial do material é condicionada fundamentalmente pela relação entre a resistência ao corte e à tração do contacto. Assim, com base em duas baterias de ensaios consecutivos com relações $\tau_c/\sigma_{n.c.}$ distintas, é possível estabelecer a razão $\tau_c/\sigma_{n.c.}$ que conduz à razão desejada entre a resistência à compressão e à tração uniaxial. Conclui-se ainda que o termo coesivo tem uma influência significativa no valor final da tensão de rotura por compressão simples, e que esta rotura é precedida de micro-roturas por corte.

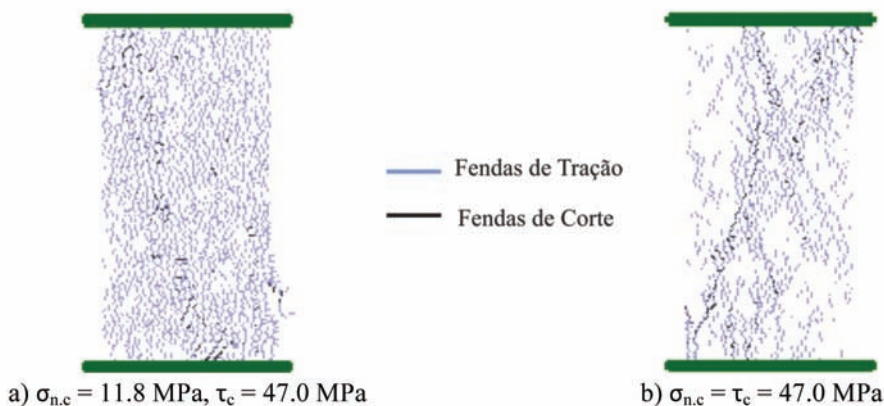


Fig. 13 – Padrões de fendilhação obtidos nos modelos VGCM-2D frágil, com diferente resistência à tração do contacto e resistência ao corte constante – Ensaio de compressão simples.

3.1.3.2 – Atrito entre partículas

Para analisar a influência do coeficiente de atrito do contacto, μ_c , no comportamento do material, realizaram-se diversos ensaios, admitindo as propriedades indicadas no Quadro 3.

Quadro 3 – Micro-propriedades utilizadas na análise da influência de μ_c , no comportamento do material.

\bar{E} [kPa]	η	$\sigma_{n,c}$ [MPa]	τ_c [MPa]
33.4×10^6	0.27	23.5	47.0

De acordo com os resultados apresentados na Fig. 14, o aumento do coeficiente de atrito entre partículas conduz a um acréscimo no ângulo de atrito do material e consequente aumento da sua resistência à compressão, Fig. 15. A resistência à tração do material é pouco sensível à variação da referida micro-propriedade. Da análise da Fig. 14 verifica-se ainda que para valores mais elevados do coeficiente de atrito do contacto a coesão macroscópica do material é reduzida.

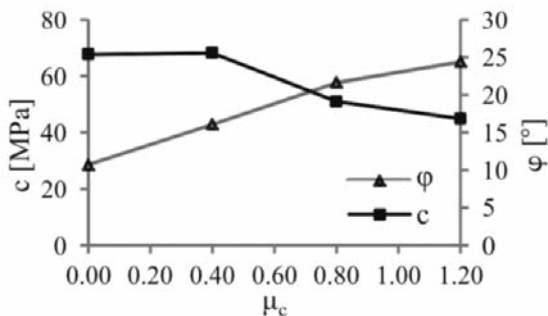


Fig. 14 – Variação do ângulo de atrito e da coesão do material com o coeficiente de atrito do contacto.

A influência do coeficiente de atrito do contacto está interligada ao fato de o esquema de geração proposto conduzir a um elevado número de contactos por partícula, Wang e Tonon (2009). Em modelos de partículas com um número baixo de contactos por partícula baixo, Potyondy e

Cundall (2004), o efeito do coeficiente de atrito do contacto é muito reduzido. No esquema de geração 2D proposto obtêm-se sistemas de partículas com aproximadamente seis contactos por partícula, praticamente o dobro do número de contactos obtidos com base no esquema proposto em Potyondy e Cundall (2004).

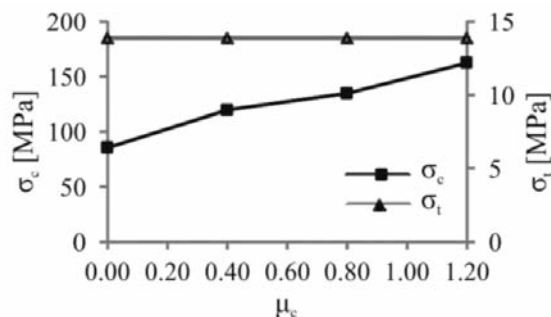


Fig. 15 – Variação da tensão de pico e da resistência à tração com o coeficiente de atrito do contacto.

3.1.4 – Modelo frágil versus modelo com enfraquecimento

No Quadro 4 apresentam-se as macro-propriedades obtidas com o modelo frágil de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite, Fig. 3, com base nas micro-propriedades definidas no Quadro 1 e considerando três pontos locais por plano de contacto.

Da análise do Quadro 4 verifica-se que o valor de tração última numérico obtido com base em ensaios do tipo Brasileiro é inferior ao valor de tração última obtida com base em ensaios diretos. Em rocha é usual obter valores experimentais da tração indireta superiores aos valores experimentais obtidos em ensaios de tração direta. Estes resultados são coerentes com os obtidos em Azevedo (2003) para o betão, sendo referido nesse trabalho a necessidade de se adotar um modelo com leis de enfraquecimento, por forma a se obter uma relação coerente entre os valores obtidos em ensaios de tração indiretos e diretos.

Pelo motivo anteriormente apontado optou-se por verificar qual a influência de um modelo com leis de enfraquecimento da resistência à tração e do termo coesivo do contacto, Fig. 4. O modelo com lei de enfraquecimento adota os parâmetros resistentes iguais aos do modelo frágil, Quadro 1, mas inclui uma energia de fratura do contacto à tração de $G_{f,n} = 276.1$ N/m, e uma energia de fratura no termo coesivo de $G_{f,s} = 4158.0$ N/m. Os valores de energia são cerca de 11 vezes superiores ao valor da energia do contacto associado ao patamar elástico.

Os valores de energia de fratura adotados no contacto foram definidos com base num processo iterativo de tentativa e erro de modo a obter um valor da resistência à tração em ensaio direto próximo do valor da resistência à tração obtida em ensaio de compressão diametral. A energia de fratura do contacto adotada no ramo de tração, $G_{f,n} = 276.1$ N/m, é de cerca de 25% da energia de fractura macroscópica medida nos ensaios numéricos em tração direta, 1190 N/m.

Para uma dada rocha, os valores da energia de fratura a adotar ao nível do contacto podem ser calibrados com maior exatidão se for conhecida a resposta do material em tração direta, de preferência numa geometria com um entalhe inicial a meia altura ou, em alternativa, se for conhecida a resposta em ensaios de flexão de provetes cilíndricos com entalhe central, ensaios *Chevron Bend*.

Analizando os resultados indicados no Quadro 4, bem como as envolventes de rotura apresentadas na Fig. 16, verifica-se que o modelo associado ao critério de rotura com enfraquecimento apresenta tensões de pico superiores e uma maior relação entre a resistência à compressão e à tração

Quadro 4 – Macro-propriedades: modelo frágil e com enfraquecimento.

Modelo do contacto	σ_c [MPa]	σ_t^{direta} [MPa]	σ_t^{direta} [MPa]	ϕ [°]	c [MPa]	σ_c / σ_t
Frágil	117.33	13.9	9.20	42.9	25.6	8.46
Com enfraquecimento	173.8	18.6	18.5	40.6	40.0	9.37

uniaxial do material. Neste modelo, os deslocamentos relativos entre partículas são superiores aos admitidos no critério de rotura frágil, conduzindo a um aumento da resistência do material e conferindo alguma ductilidade.

O efeito da redução gradual da resistência à tração do contacto, que caracteriza o critério de rotura com enfraquecimento, é mais evidente na resistência à tração obtida no ensaio de compressão diametral, Quadro 4. Ao contrário do modelo com critério de rotura frágil, o modelo com enfraquecimento permitiu obter uma resistência à tração indireta muito próxima da obtida no ensaio de tração uniaxial direto. Em ensaios em rochas de natureza similar é usual obter valores de tração indireta ligeiramente superiores aos valores de tração direta, Klanphumeesri (2010) e Erarslan e Williams (2012). Vários factores podem contribuir para esta diferença, nomeadamente o fato 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.

De referir que os ensaios de compressão diametral são mais usuais que os ensaios de tração simples, pois nestes não só é complicado garantir a ligação das placas ao provete, como é difícil garantir a centragem das forças e conhecer previamente a zona de localização das fendas, a não ser que se adotem provetes com entalhes a meia altura.

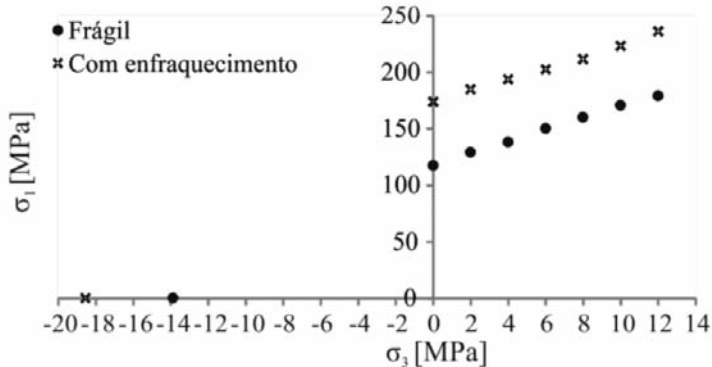


Fig. 16 – Envoltórias de rotura obtidas nos modelos associados aos critérios de rotura frágil e com enfraquecimento.

3.2 – Rocha Augig

A calibração do modelo foi realizada recorrendo a resultados de ensaios de compressão triaxial e ensaios do tipo Brasileiro, realizados em amostras de granito Augig, Kazerani e Zhao (2010). O comportamento mecânico da rocha em questão foi simulado com o modelo VGCM-2D, considerando três pontos locais por plano de contacto e admitindo os modelos constitutivos de Mohr-Coulomb com tensão de tração limite, VGCM 2D 3LP frágil, e com leis de enfraquecimento, VGCM-2D 3LP com enfraquecimento, admitindo para este último uma energia de fratura, G_f , onze vezes superior à energia associada ao ramo elástico da lei de enfraquecimento, quer na resistência à tração quer no termo coesivo.

Quadro 5 – Micro-propriedades adotadas nos modelos de elementos discretos.

	\bar{E} [kPa]	η	μ_c	$\sigma_{n,c}$ [MPa]	τ_c [MPa]	G_{fn} [N/m]	G_{fs} [N/m]
VCGM-2D 3LP frágil	33.4×10^6	0.27	0.40	13.7	48.8	5.98	188.85
VCGM-2D 3LP com enfraquecimento	33.4×10^6	0.27	0.55	11.5	33.2	65.78	2077.35

As micro-propriedades definidas após o processo de calibração, encontram-se apresentadas no Quadro 5. Indicam-se as energias de fratura associadas ao modelo frágil por forma a se poder comparar com os valores da energia de fratura adotados nas leis com enfraquecimento.

No Quadro 6 são sintetizados os resultados obtidos em ensaios laboratoriais, Kazerani e Zhao (2010), os resultados obtidos com modelos de elementos poligonais, Kazerani e Zhao (2010) e os resultados obtidos após calibração com o modelo VCGM 2D, frágil e com enfraquecimento. Verifica-se uma excelente correlação com os resultados experimentais e com os resultados obtidos com um modelo de partículas poligonais mais complexo, Itasca-UDEC (2004).

Nos ensaios de tração direta com o modelo VCGM-2D 3LP com enfraquecimento obteve-se um valor da energia de fratura macroscópica médio de 300 N/m. O valor da energia de fratura adotada no ramo de tração, 65.78 N/m, é de cerca de 20% deste valor. O valor da energia de fratura experimental medida em diversos tipos de granitos está dentro da ordem de grandeza do valor macroscópico da energia de fratura obtida nos ensaios numéricos, Vasconcelos (2005).

Quadro 6 – Macro-propriedades do granito Augig: valores experimentais e numéricos.

	\bar{E} [GPa]	η	q_u [MPa]	σ_t^{dir} [MPa]	σ_t^{indir} [MPa]	c [MPa]	ϕ [°]
Ensaio experimental e numérico, Kazerani e Zhao (2010)	25.8	0.23	122.1	-	8.8	21.0	53.0
VCGM-2D 3LP frágil	25.8	0.23	119.4	8.0	5.4	21.5	50.4
VCGM-2D 3LP com enfraquecimento	25.8	0.23	121.9	9.1	11.1	21.9	50.5

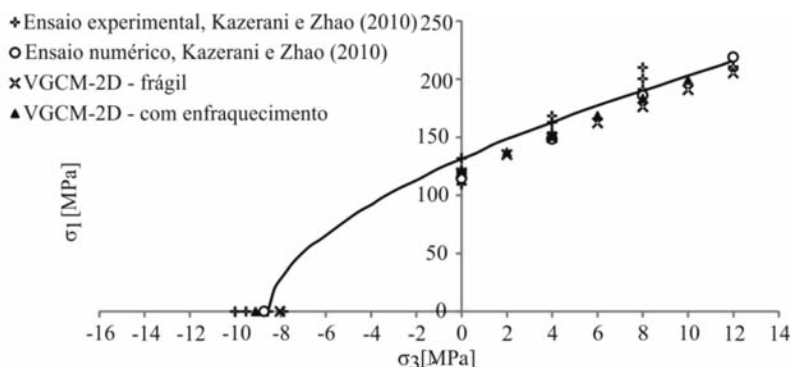


Fig. 17 – Envolventes de rotura obtidas a partir de ensaios laboratoriais e modelos de partículas poligonais, Kazerani e Zhao (2010) e simulações realizadas com o modelo VCGM-2D.

Comparando as envolturas de rotura apresentadas na Fig. 17, conclui-se que o modelo de partículas adotado é capaz de prever o comportamento de uma rocha granítica Augig, em termos de resistência, para ambos os critérios de rotura. Verifica-se ainda que, ao contrário dos modelos de partículas circulares tradicionais, se obtém uma boa estimativa da relação σ_c / σ_t . Desta forma, poderá concluir-se que o modelo VCGM-2D constitui uma boa aproximação ao modelo de elementos discretos com partículas poligonais, Kazerani e Zhao, 2010, computacionalmente mais exigente.

Na Fig. 17 representa-se ainda, linha a cheio, a envoltura de rotura do modelo de resistência de Hoek-Brown, Hoek e Brown (1980), aplicado aos ensaios experimentais realizados em Kazerani e Zhao (2010).

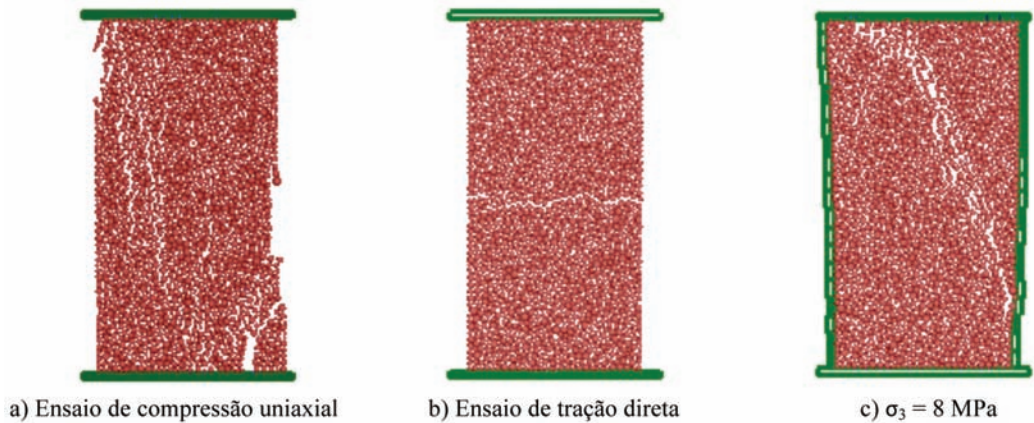


Fig. 18 – Padrões de fratura obtidos nos modelos VGCM-2D frágil.

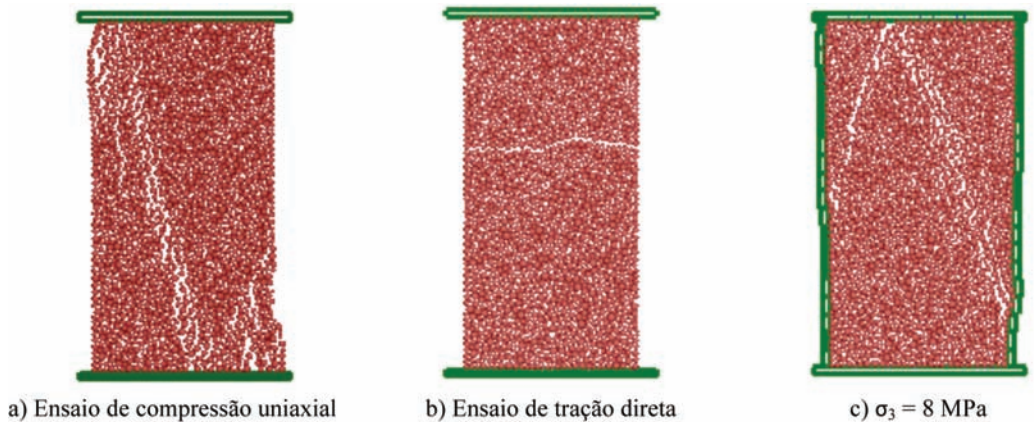


Fig. 19 – Padrões de fratura obtidos nos modelos VGCM-2D com leis de enfraquecimento.

Os padrões de fratura obtidos nos ensaios de compressão uniaxial, tração direta e ensaios biaxiais com tensão de confinamento de 8MPa, associados aos critérios de rotura frágil e com enfraquecimento, são apresentados na Fig. 18 e Fig. 19, respetivamente. Verifica-se que um aumento da tensão de confinamento conduz ao desenvolvimento de superfícies de corte com uma dada inclinação. Tal como expectável, a superfície de rotura no ensaio de tração é perpendicular à direção da carga, e num ensaio de compressão simples sem atrito nas placas, as superfícies de rotura são praticamente paralelas à direção da carga.

Analisando o estado final da amostra, verifica-se que o modelo de partículas proposto é capaz de representar os mecanismos de rotura geralmente observados em materiais com rotura quase-frágil, tais como a rocha. É de notar que no modelo VGCM-2D com enfraquecimento, a rotura do contacto ocorre para um deslocamento relativo entre partículas superior, apresentando consequentemente um menor número e uma maior localização de contactos fendilhados, Fig. 18 e Fig. 19.

Como consequência dos fatores referidos anteriormente, a resistência à tração determinada através de ensaios do tipo Brasileiro, σ_t^{indir} , tende a ser superior à resistência real do material, podendo esta última ser obtida através de ensaios de tração direta, σ_t^{dir} . Esta tendência apenas foi verificada no modelo com leis de enfraquecimento, *softening*, o qual produziu um padrão de fratura, Fig. 20 b), muito semelhante ao observado nos ensaios laboratoriais realizados em amostras de granito Augig, Kazerani (2011).

É de notar que em ambos os modelos o material sintético apresentou uma rotura frágil, Fig. 21, pelo que a incorporação de uma lei de enfraquecimento ao nível do contacto para valores de energia de fratura reduzidos não se traduz diretamente num comportamento macroscópico menos frágil.

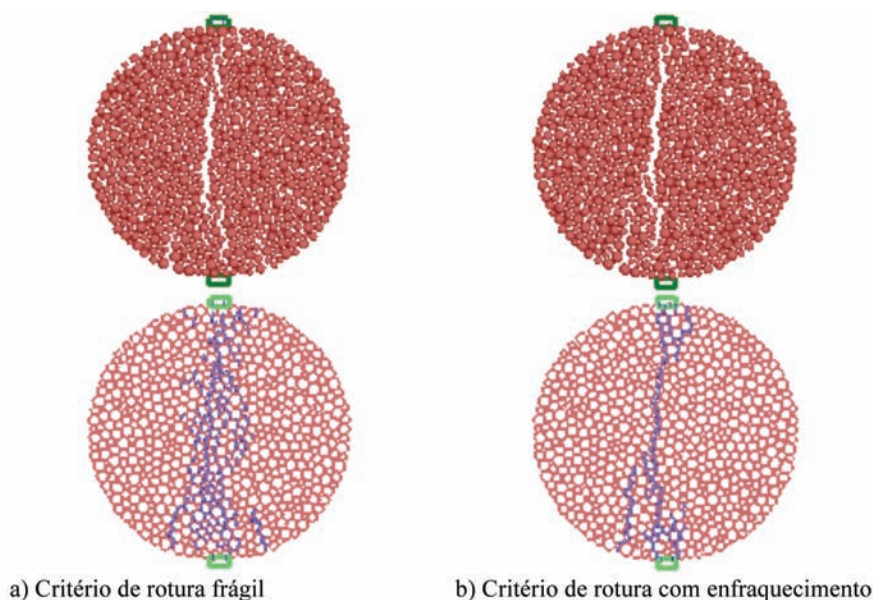


Fig. 20 – Padrões de fratura obtidos em ensaios de compressão diametral.

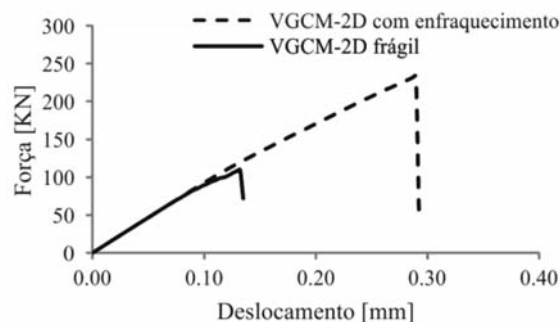


Fig. 21 – Relação força-deslocamento da placa superior, obtidas nos ensaios de compressão diametral.

A Fig. 22 apresenta os diagramas tensão-deformação dos ensaios realizados com o modelo VGCM-2D, frágil e com enfraquecimento, bem como os resultados obtidos por Kazerani e Zhao (2010), quer através do modelo de elementos discretos Itasca-UDEC (2004), quer através de ensaios experimentais realizados em prensa com controle de deformação. Comparando as curvas referidas anteriormente conclui-se que o modelo utilizado conseguiu simular o comportamento à compressão do material, tendo produzido resultados semelhantes aos obtidos no modelo de partículas poligonais Itasca-UDEC (2004), que adota uma interação mais complexa entre partículas.

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 acordo com Bieniawski (1967), nas curvas tensão-deformação obtidas em ensaios de compressão podem ser identificados três níveis de tensão que assinalam uma mudança no comportamento do material, nomeadamente a tensão associada ao início da propagação das fendas, σ_{ci} , a tensão a partir da qual se inicia a propagação instável das fendas e ocorrem deformações axiais permanentes (início da dilatância), σ_{cd} , e a tensão de pico, σ_f .

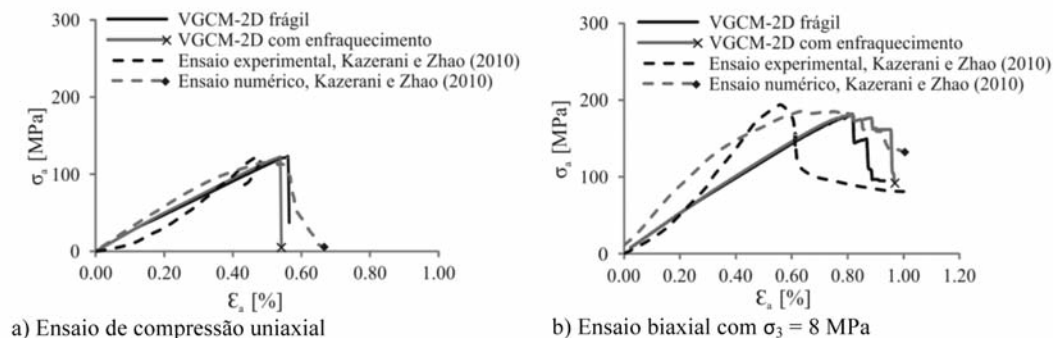


Fig. 22 – Diagramas tensão-deformação axial: modelos VGCM-2D versus ensaios laboratoriais e simulações numéricas realizadas com modelos de partículas poligonais, Kazerani e Zhao, (2010).

Segundo Brace *et al.* (1966), em ensaios de compressão uniaxial realizados em amostras de rocha com porosidade baixa a fendilhação instável ocorre para tensões entre 0.3 e 0.5 da tensão de pico, σ_f , valor a partir do qual poderá ocorrer dilatação da amostra. De acordo com os resultados apresentados no Quadro 7, o modelo VGCM-2D com enfraquecimento permitiu prever o início da dilatação para um nível de tensão semelhante ao indicado por Brace *et al.* (1966) para uma rocha similar, $\sigma_{ci} = 0.34 \sigma_f$.

Quadro 7 – Número de fendas formadas ao longo do ensaio de compressão uniaxial.

Modelo do contacto	Fendas [%]	Dano [%]	Fendas por tração [%]	Fendas por corte [%]	Fendas/ /Dano após σ_f [%]	σ_{ci} / σ_f	σ_{cd} / σ_f
Frágil	49.0	-	92.4	7.6	33.8	0.14	0.25
Com enfraquecimento	20.0	45.4	96.8	3.2	21.2	0.12	0.36

Neste estudo, a tensão σ_{ci} foi identificada recorrendo ao gráfico que relaciona a deformação volumétrica provocada pela abertura de fendas, $\epsilon_{v,crack}$, com a deformação axial, Martin e Chandler

(1994). A deformação volumétrica associada à abertura de fendas, $\epsilon_{v,crack}$, corresponde à diferença entre a deformação volumétrica total, ϵ_v , e a deformação volumétrica elástica, $\epsilon_{v,el}$. Nos ensaios realizados a deformação volumétrica foi calculada com base na medição das extensões na zona central do sistema de partículas, na direção vertical e na direção horizontal. A deformação volumétrica elástica foi calculada com base nas constantes elásticas iniciais, admitindo que o sistema de partículas se encontra num estado plano de tensão.

Na Fig. 23 representa-se a relação entre a deformação volumétrica e a deformação axial, bem como a evolução da propagação de fendas/dano ao longo do ensaio para os dois tipos de modelo constitutivo. Para analisar o estado real do modelo de partículas, optou-se por representar na Fig. 23, para o modelo com enfraquecimento, a percentagem de dano registada ao longo do ensaio, em vez da percentagem de fendas, contactos com dano unitário. É de notar que apesar de a percentagem de fendas obtidas no modelo com enfraquecimento ser consideravelmente baixa quando comparada com as fendas formadas no modelo de rotura frágil, Quadro 7, o sistema de partículas apresenta diversos contactos que já exibem dano não nulo à tração e/ou corte, 45.4% de dano, isto é, deslocamento entre partículas superior a U_n^y ou U_n^x , Fig. 4.

Analisando as curvas obtidas no modelo com rotura frágil, é possível verificar que a amostra apresenta dilatância a partir do momento em que ocorre a propagação instável de fendas, tal como verificado por Brace *et al.* (1966). No modelo VGCM-2D com enfraquecimento a dilatação da amostra ocorre para uma deformação axial superior, pois este permite um maior deslocamento relativo entre partículas antes da rotura e consequente formação de maiores deformações e menor número de fendas.

Na Fig. 24 representa-se a evolução da tensão de compressão uniaxial em função da extensão axial, lateral e volumétrica para os modelos constitutivos testados, frágil e com enfraquecimento bilinear, bem como a variação da tensão de compressão uniaxial com a extensão lateral e axial, ob-

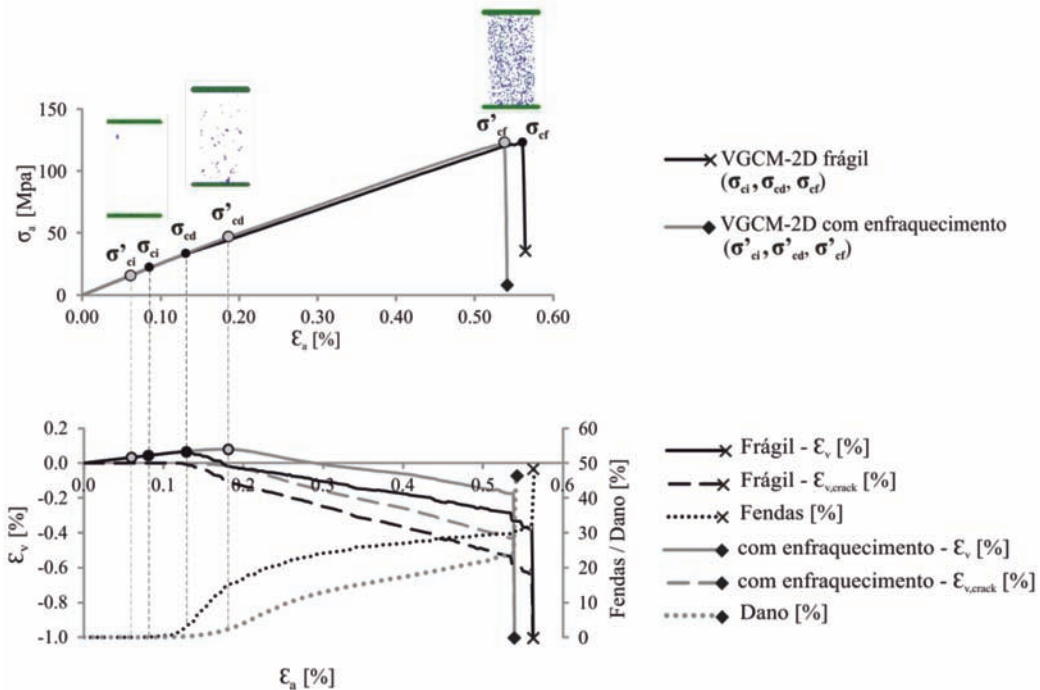


Fig. 23 – Relação entre a deformação volumétrica e a propagação de fendas/dano no sistema de partículas em ensaios de compressão simples.

tida experimentalmente, Kazerani (2011). É de notar que em ambos os modelos, o material sintético apresenta uma rotura frágil, Fig. 24, com uma evolução da extensão volumétrica em função da extensão lateral e da tensão de compressão uniaxial em função da extensão axial próximas das curvas obtidas experimentalmente, Kazerani (2011).

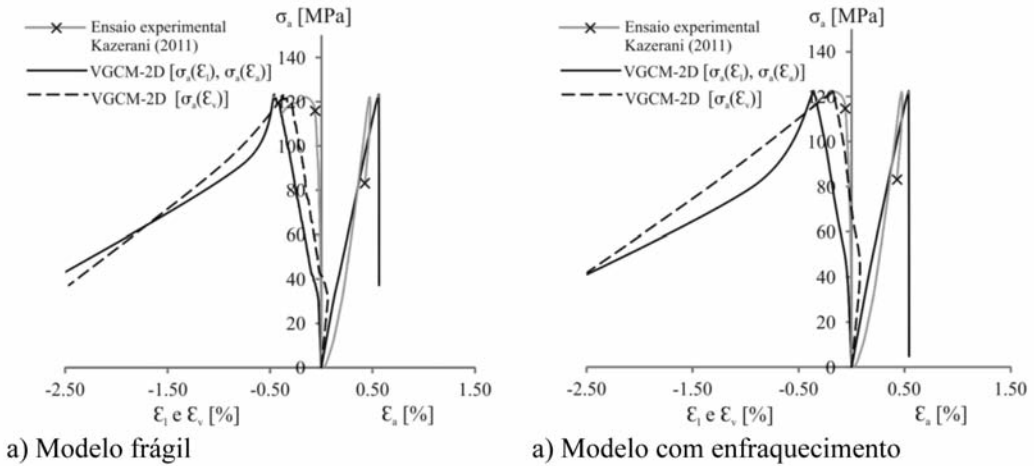


Fig. 24 – Evolução da tensão uniaxial em função da extensão axial, lateral e volumétrica em ensaios de compressão simples: Ensaios numéricos e experimentais, Kazerani (2011).

Na Fig. 25 apresenta-se a evolução do número de fendas ao longo do ensaio de compressão simples e a variação da tensão uniaxial com a extensão lateral. Verifica-se que a resposta obtida em ambos os modelos, frágil e com enfraquecimento, é muito próxima. Tal como referido anteriormente, desde que se adotem, ao nível do contacto, valores de energia de fratura baixos, a incorporação de uma lei de enfraquecimento não se traduz diretamente num comportamento macroscópico menos frágil.

A evolução do número de fendas ao longo do ensaio de compressão, obtido com o modelo VGCM-2D, frágil e com enfraquecimento, é semelhante ao descrito por diversos autores, Brace *et al.* (1966), Martin e Chandler (1994) e Diederichs (2003). De acordo com as curvas apresentadas

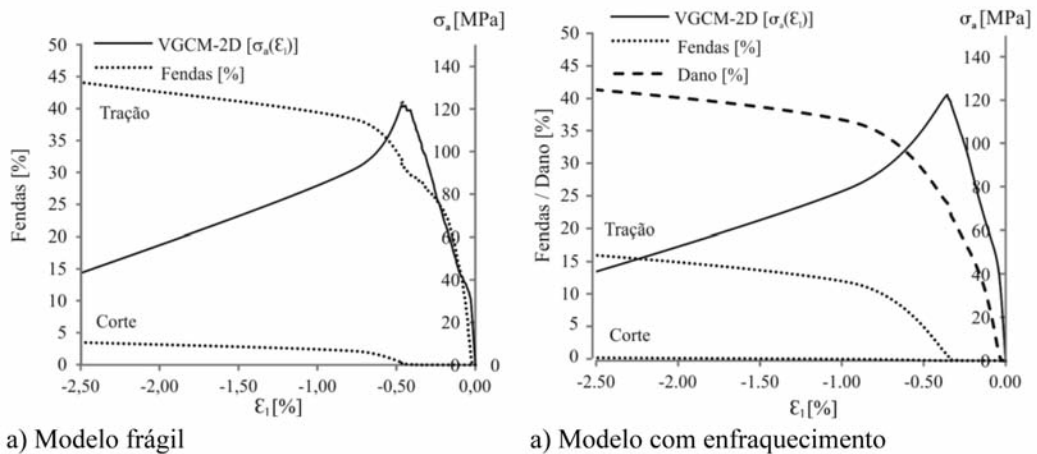


Fig. 25 – Evolução da tensão uniaxial e propagação de fendas/dano em função da extensão lateral em ensaios de compressão simples: Ensaios numéricos e experimentais.

na Fig. 24, o processo de fendilhação está inicialmente associado a mecanismos de tração, sendo apenas verificada a formação de fendas por corte para níveis de deformação superiores. Este último tipo de fendas surge para acomodar as deformações provocadas pela abertura e coalescência das fendas associadas à rotura por tração dos contactos.

Os resultados apresentados correspondem aos valores médios obtidos em quatro sistemas de partículas com características semelhantes, gerados segundo constantes de aleatoriedade diferentes. A variação máxima dos resultados relativamente aos valores médios correspondeu a 8,0%, tendo sido verificados maiores desvios nos ensaios executados com o modelo de contacto frágil.

4 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

O modelo de partículas VGCM-2D, 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 de partículas apresentado constitui uma abordagem alternativa baseada na simulação numérica dos processos elementares de rotura, no qual a resposta macroscópica complexa aparece em função de interações simples entre partículas. O modelo utilizado é constituído por partículas circulares, contudo a interação entre elementos é executada através de interfaces poligonais, discretizadas segundo um dado número de pontos de contacto locais, que conferem a capacidade de transmissão de momentos.

O estudo paramétrico apresentado contribuiu para a caracterização dos parâmetros do modelo VGCM-2D e avaliação dos seus efeitos no comportamento do material, permitindo a definição de uma estratégia de calibração. Nesta análise verificou-se que a adoção de três pontos locais por plano de contacto é suficiente para incluir o efeito de transmissão de momentos ao nível do contacto, apresentando vantagens relativamente à duração do processo de simulação.

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 que a relação entre a resistência à compressão e à tração uniaxial depende fundamentalmente da relação entre o termo coesivo e a resistência à tração do contacto. Demonstra-se que a resistência à compressão do material é sensível à variação da coesão e do coeficiente de atrito do contacto.

Os modelos constitutivos adotados permitiram reproduzir o comportamento resistente de um granito Augig e identificar planos de rotura semelhantes aos observados em ensaios laboratoriais. É possível calibrar o modelo, quer frágil quer com enfraquecimento, de modo a obter a relação entre a resistência à compressão e à tração uniaxial de uma rocha granítica Augig, bem como uma envolvente de rotura próxima da obtida experimentalmente.

O critério de rotura com enfraquecimento demonstrou ser o mais adequado, apresentando vantagens relativamente ao critério de rotura frágil, nos ensaios do tipo Brasileiro. 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. De referir que sistemas de partículas com leis de enfraquecimento nos contactos continuam a apresentar uma resposta frágil quer à tração, quer à compressão.

Para os sistemas de partículas utilizados, o valor da energia de fratura adotado no contacto no ramo de tração foi de cerca de 20% do valor macroscópico obtido numericamente, valor este que está dentro da ordem de grandeza dos valores de energia de fratura obtidos em ensaios de tração em rochas de natureza granítica. É possível reduzir os valores a adotar para a energia de fratura ao nível do contacto desde que se adicione ao modelo de partículas mais mecanismos de resistência à propagação da fratura, por exemplo representando-se com mais detalhe a heterogeneidade do material, a geometria dos grãos e a sua variação dimensional.

Comparando os resultados associados ao modelo VGCM-2D com os obtidos em simulações numéricas executadas com modelos poligonais complexos, conclui-se que o modelo de partículas adotado neste estudo constitui uma boa aproximação aos modelos de partículas poligonais, apresentando vantagens associadas a uma menor exigência computacional.

A formulação aqui apresentada pode ser facilmente incorporada em programas de partículas comerciais e em programas de código livre. No entanto, é ainda necessário continuar a realizar investigação na área da mecânica de fratura em rocha com modelos de partículas de modo a se obter uma representação da estrutura granular mais próxima da real e se incorporarem modelos constitutivos mais complexos.

5 – AGRADECIMENTOS

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

6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Azevedo, N. (2003). *A rigid particle discrete element model for the fracture analysis of plain and reinforced concrete*. PhD Thesis. Heriot-Watt University, Scotland.
- Azevedo, N.; 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.V. (2011). *Particle geometry effect in rock fracture using a rigid particle discrete element method*. Congress on Numerical Methods in Engineering. Coimbra.
- Bieniawski, Z. (1967). *Mechanism of brittle fracture of rock*. International Journal of Rock Mechanics and Mining Science & Geomechanics Abstracts, 4, pp. 395-430.
- Brace, W.; Paulding, B.; Scholz, C. (1966). *Dilatancy in the fracture of crystalline rocks*. Journal of Geophysical Research, 71, pp 3939–3953.
- Cho, N.; Martin C.D.; Sergio D.C. (2007). *A clumped particle model for rock*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, 44, pp. 997-1010.
- Cundall, P.A. (1971). *A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems*. Proceedings of the Symposium of the International Society for Rock Mechanics, Nancy 2, No.8.
- Cundall, P.A.; Strack, O.D.L. (1979). *A discrete numerical model for granular assemblies*. Géotechnique, 29, No. 1, pp. 47-65.
- Cundall, P.A. (1987). *Distinct element models of rock and soil structure*. Analytical and Computational Methods in Engineering Rock Mechanics, E. T. Brown, Ed., Ch. 4, pp.129-163. London: George Allen & Unwin.
- Diederichs, M.S. (2000). *Instability of hard rock masses: the role of tensile damage and relaxation*. PhD Thesis. University of Waterloo.
- Diederichs, M.S. (2003). *Rock Fracture and Collapse Under Low Confinement Conditions*. Rock Mechanics and Rock Engineering, 36, 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, 49, pp. 21-30.
- Fahimifar, A.; Malekpour, M. (2012). *Experimental and numerical analysis of indirect and direct tensile strength using fracture mechanics concepts*. Bulletin of Engineering Geology and the Environment, 71, pp. 269–283. Springer.
- Hentz, S.; Daudeville, L.; Donze, V. (2004). *Identification and Validation of a discrete element model for concrete*, Journal of Engineering Mechanics ASCE, 130 (6), pp. 709-719.
- Hoek, E.; Brown, E.T. (1980). *Underground excavations in rock*, Institute of Mining and Metallurgy. London.
- Itasca, UDEC (2004). *Universal Distinct Element Code, Version 4.0*, Itasca consulting group, Minneapolis.
- 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, 34, pp. 1877-1895.
- Kazerani, T. (2011). *Micromechanical study of rock fracture and fragmentation under dynamic loads using discrete element method*. PhD Thesis. Lausanne, Switzerland.
- Klanphumeesri, S. (2010). *Direct tension tests of rock specimens*. MSc Thesis. Surarane University of Technology, Thailand.
- Lan, H.; Martin, C.D.; Hu, B. (2010). *Effect of Heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behaviour during compression loading*. Journal of Geophysical Research, 115, pp. 1-14.
- Lemos, J. V. (2004). *Os modelos de elementos discretos em geomecânica - evolução e perspectivas futuras*. Geotecnia - Revista da Sociedade Portuguesa de Geotecnia, 100, pp. 333-344.
- Lilliu, J.; Van Mier, M. (2003). *3D lattice type fracture model for concrete*, Engineering Fracture Mechanics, 70 (7-8), pp. 841-927.
- Martin, C.D.; Chandler, N.A. (1994). *The progressive fracture of Lac du Bonnet granite*. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts, 31, pp. 643–659.
- Meguro K.; Hakuno, M. (1989). *Fracture analysis of concrete structure by the modified distinct element method*. Structural Engineering / Earthquake Engineering, 6 (2), pp. 283-294.
- Okabe, A.; Boots, B.; Sugihara, K. (1992). *Spatial tessellations. Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. Wiley Series in Probability and Statistics.
- Potyondy, D.; Cundal, P. (1996). *Modeling rock using bonded assemblies of circular particles*, 2nd North American Rock Mechanics Symposium, Aubertin et al., Eds, Balkema, pp. 1937-1944.
- Potyondy, D.O.; Cundall, P.A. (2004). *A bonded-particle model for rock*. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, 41, pp. 1329-1364.
- Potyondy, D. (2010). *A grain-based model for rock: approaching the true microstructure*. Proceedings, Bergmekanikk i Norden 2010 — Rock Mechanics in the Nordic Countries, 41, C. C. Li et al., Eds, pp. 225-234. Norway.
- 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 simulation of concrete using lattice models: Computational aspects*. Engineering Fracture Mechanics, 57, pp. 319-332.
- Underwood, P. (1983). *Dynamic relaxation*. Computational Methods for Transient Analysis, pp. 246-265. (T. Belytschko & T.J.R. Hughes, Eds.) New York: North-Holland.
- Vasconcelos, G. (2005). *Investigação experimental na mecânica da alvenaria de pedra: Caracterização de granitos e comportamento de paredes antigas de alvenaria de pedra*. PhD Thesis. Universidade do Minho, Portugal.
- Wang, Y.; Tonon, F. (2009). *Modeling Lac du Bonnet granite using a discrete element model*, International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, 46, pp. 1124-1135.