

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**SIMULAÇÃO DE RESISTÊNCIA E DEFORMABILIDADE DE
ROCHAS VIA ELEMENTOS DISCRETOS COM
PARTÍCULAS CIMENTADAS**

LUIS DAVID MEDINA CHAPARRO

ORIENTADOR: MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, PhD

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA

BRASÍLIA - DF: JUNHO/2017

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**SIMULAÇÃO DE RESISTÊNCIA E DEFORMABILIDADE DE
ROCHAS VIA ELEMENTOS DISCRETOS COM
PARTÍCULAS CIMENTADAS**

LUIS DAVID MEDINA CHAPARRO

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
GEOTECNIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE**

APROVADA POR:

**MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, PhD (UnB)
(ORIENTADOR)**

**MANOEL PORFÍRIO CORDÃO NETO, DSc. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)**

**IRVIN PÉREZ MORALES, PhD (UCLV)
(EXAMINADOR EXTERNO)**

DATA: BRASÍLIA/DF, 16 de JUNHO de 2017.

FICHA CATALOGRÁFICA

CHAPARRO, LUIS DAVID MEDINA.

Simulação de resistência e deformabilidade de rochas via elementos discretos com partículas cimentadas, Distrito Federal, 2017.

xviii, 92p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2017)

Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

1. Método dos Elementos Discretos	2. Materiais granulares
3. Resistência	4. Ligação paralela
I. ENC/FT/UnB	II. Mestre

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

CHAPARRO, L.D.M. (2017). Simulação de resistência e deformabilidade de rochas via elementos discretos com partículas cimentadas, Distrito Federal. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-288/17, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 92p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Luis David Medina Chaparro

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO Simulação de resistência e deformabilidade de rochas via elementos discretos com partículas cimentadas.

GRAU: Mestre

ANO: 2017

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de Mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta monografia de Projeto Final pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Luis David Medina Chaparro

Brasília/DF - Brasil

davesmedina@gmail.com

A minha família!

AGRADECIMENTOS

O mestrado foi uma grande oportunidade que me enche de satisfação. Meus sinceros agradecimentos a todas as pessoas envolvidas durante esta etapa da minha vida.

Meus pais, um grande suporte emocional e intelectual ao longo de todas as minhas andanças na vida. Minha educação somente chegou a esse ponto graças ao esforço e dedicação de vocês.

Ao meu orientador, Márcio Muniz de Farias, pelo incentivo e por toda a ajuda durante esse trabalho. A sua paciência e dedicação foram essenciais para o sucesso do trabalho. Sua orientação foi extremamente valiosa.

Ao professor Carlos Recarey por compartilhar seu conhecimento e experiências no tema estudado, que muitas vezes me ajudaram a sair do buraco.

Ao doutor Syed Mahmood pelo auxílio com o uso da ferramenta numérica e por toda sua contribuição com o trabalho realizado.

Ao todos os amigos que participaram direta e indiretamente dessa pesquisa. A Laura Vidaurrieta por me motivar, muitas vezes durante todo este tempo, a Isabel Gomes por ajuda indispensável na revisão do texto.

Aos colegas do Infralab, principalmente aos amigos Bernardo Cascão e Liosber Medina.

A todos os demais professores do departamento de Pós-Graduação em Geotecnia da Universidade de Brasília pelos ensinamentos transmitidos, contribuíram para o meu amadurecimento acadêmico. Guardo grande admiração por este nobre conjunto de profissionais.

À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro durante a execução desse trabalho.

RESUMO

O objetivo principal desta pesquisa é contribuir para o entendimento do comportamento de resistência e deformabilidade de rochas sãs, com base em uma abordagem discreta, utilizando o Método dos Elementos Discretos (DEM) e modelos de contato e de cimentação entre grãos adequados para este tipo de geomaterial. Para tanto, tomou-se como base uma série de ensaios laboratoriais disponíveis na literatura internacional. Os dados são relativos a uma rocha magmática, conhecida como granito do Lago de Bonnet (*Lac du Bonnet granite*), e incluem resultados de ensaios de compressão simples, resistência à tração por compressão diametral e triaxiais convencionais. Nesta dissertação foram reproduzidos os ensaios de compressão simples e tração indireta. Para realização das análises via DEM adotou-se o software STAR-CCM+, que é um programa relativamente novo, com uma boa base de modelos e foi disponibilizado para avaliação pelos fornecedores. O primeiro desafio é gerar um pacote de partículas com uma distribuição espacial de cimentação que seja computacionalmente aceitável e que possa reproduzir os parâmetros macroscópicos de deformabilidade e de resistência observados nos ensaios. Amostras cilíndricas de 60 mm de altura por 30 mm de diâmetro foram geradas com uma combinação de técnicas, conhecidas por *oversetting* e *trimmed mesh*, e o empacotamento denso de partículas foi obtido por deposição gravitacional em camadas. Foram utilizadas cerca de 5000 partículas esféricas com diâmetro médio de 2,12 mm para viabilizar o tempo de cálculo. Um segundo passo crítico consiste na escolha dos modelos de contato. Foram testados o modelo sem deslizamento de Hertz-Mindlin e o modelo linear tradicional. Para a ligação entre partículas adotou-se o modelo de partículas cimentadas BPM (*Bonded Particle Model*), baseado na teoria de vigas. Os melhores resultados foram obtidos com a combinação do modelo de contato linear com o BPM, com os quais foi possível reproduzir qualitativamente e quantitativamente os diversos estágios de evolução de dano numa amostra de rocha sujeita a compressão simples. Estes estágios incluem uma acomodação inicial, uma fase linear elástica, uma fase de iniciação estável de fissuras, uma fase de fissuramento instável com dilatação volumétrica, chegando ao pico de resistência, seguido de uma ruptura frágil pós-pico. A identificação destes estágios está diretamente relacionada com a evolução das quebras de cimentação entre os grãos. O mesmo conjunto de parâmetros calibrado para o ensaio de compressão simples foi usado para reprodução dos ensaios de tração indireta. O mecanismo de ruptura neste ensaio foi reproduzido adequadamente, porém o valor de resistência à tração foi superestimado em função de se ter adotado o mesmo valor de resistência para a cimentação sob tração e cisalhamento. Finalmente, fez-se uma análise paramétrica da influência do módulo de Young e do tamanho das partículas em algumas propriedades macroscópicas adotadas em modelos fenomenológicos do tipo elástico perfeitamente plástico. Desta análise conclui-se que a resistência a compressão da amostra aumenta e a deformação na ruptura diminui com o aumento da rigidez dos grãos. Conclui-se também que a resistência à tração aumenta, enquanto a resistência a compressão e o módulo de Young macroscópicos diminuem à medida que se aumenta o tamanho dos grãos, mantendo-se constante o tamanho da amostra. Foram estabelecidas equações de ajuste logarítmicas para estas relações, as quais apresentam dispersão crescente à medida que se aumenta o tamanho dos grãos. A partir destas relações fica evidente que a abordagem contínua pode ser utilizada quando da relação entre o diâmetro da amostra e o diâmetro do grão excede cerca de 20 vezes; caso contrário deve-se dar preferência a uma abordagem discreta, a depender da propriedade de interesse.

Palavras-chave: Método dos Elementos Discretos, Rocha, Cimentação, Resistência.

ABSTRACT

The main objective of this research is gaining insight about characteristics of deformability and strength of sound rock samples. A discrete numerical approach based on the Discrete Element Method (DEM), together with appropriate particle contact and bonding models, is adopted. Laboratory data available in international literature is used to calibrate the models. These data include unconfined compression, indirect tensile and conventional triaxial tests carried out in Lac du Bonnet granite. Unconfined compression and indirect tensile tests were simulate using STAR-CCM+, a relatively new software, with a good library of contact models. The first challenge is to generate a dense packing of spherical particles with a spatial distribution of particle bonds, capable of reproducing the observed macroscopic behavior in an acceptable computational time. Cylindrical samples, 60 mm in height by 30 mm in diameter, were generated using a combination of oversetting and trimmed mesh techniques. The cylinder was filled with a dense packing of 5000 particles with an average diameter of 2.12 mm, using gravity deposition in successive layers. The second critical step is the definition of the interparticle models. The simple linear and the no-slip Hertz-Mindlin contact models were evaluated in combination with the BPM (Bonded Particle Model) for the cementation. The best results were with achieved with linear contact plus BPM combination, which reproduced accurately, qualitatively as well as quantitatively, the several stages of damage evolution within a sample of rock under unconfined compression. These stages include an initial accommodation, a linear elastic section, a region of crack initiation, then an unstable crack propagation stage with volumetric dilatance, followed by the peak strength and a post-peak fragile failure. It was found that the identification of these stages bear close relation with the plot of evolution of debonding between particles in the numerical test. The same set of parameters calibrated from simple compression tests was used during the simulation of the Brazilian indirect tensile test. The failure mechanism during this test was accurately reproduced, but the tensile strength was overestimated, because the same microscopic strength parameter was used for the cementation under tension and shearing. Finally, a parametric analysis was carried out to verify the influence of grain parameters, such as Young modulus and particle size, on the macroscopic parameters of the elastic perfectly plastic Mohr-Coulomb model. It could be observed that unconfined strength increases and the strain level at failure decreases for increasing values of particle Young modulus. It was also noticed that the tensile strength increases, while the unconfined strength and overall Young modulus decreases, for increasing grain diameters, provided that the sample diameter is kept constant. Logarithmic regression curves were adjusted for these relations, which also show higher dispersion around the mean value as the grain size increases. Based on these evidences, it is concluded that a continuum approach may be justified when the sample diameter exceeds about twenty times the grain size diameter; otherwise a discrete approach should be preferred depending on the property under investigation.

Key-words: Discrete Element Method, Rock, Cementation, Strength.

ÍNDICE

1.	Introdução.....	1
1.1	Identificação do Problema	4
1.2	Justificativa	4
1.3	Hipótese	5
1.4	Objetivos.....	5
1.5	Metodologia de Pesquisa	6
1.6	Estrutura da Dissertação	7
2	Revisão Bibliográfica	8
2.1	Método dos Elementos Discretos (DEM).....	8
2.1.1	Formulação do Método dos Elementos Discretos	12
2.1.2	Discretização do Meio	14
2.1.3	Integração Numérica	19
2.2	Relação micro-macro	23
3	Fundamentação Teórica	25
3.1	Modelos de Contato	25
3.1.1	Modelo de Contato Sem Deslizamento de Hertz-Mindlin	25
3.1.2	Modelo de Contato Linear	28
3.1.3	Modelos de Cimentação	30
3.2	Formulação do Modelo BPM (<i>Bonded Particle Model</i>).....	31
3.2.1	Comportamento e Parâmetros do Grão – Cimento.....	32
3.2.2	Caracterização das Micropropriedades.....	37
4	Metodologia.....	39
4.1	Material Estudado	40
4.2	Simulações Numéricas.....	40
4.2.1	Software Utilizado.....	41
4.2.2	Modelo de Contato e Parâmetros da Partícula	44

4.2.3	Modelo Geométrico.....	45
4.2.4	Geração da Amostra.....	47
4.2.5	Efeito da Discretização.....	49
4.2.6	Ensaio de Compressão Simples.....	50
4.2.7	Taxa de Carregamento.....	54
5	Resultados e Análises.....	55
5.1	Simulações Preliminares - Compressão Simples.....	56
5.2	Simulação do Ensaio Brasileiro.....	62
5.3	Apresentação e Discussão dos Resultados Quantitativos.....	66
5.4	Análise Paramétrica da Rigidez e Tamanho Dos Grãos.....	72
6	Conclusões.....	79
6.1	Sugestões para Pesquisas Futuras.....	82
	Referências bibliográficas.....	84
	Anexos.....	90
	A – Resultados graficos de simulações.....	90

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Adequação de diferentes métodos numéricos para a análise de uma escavação em uma massa de rocha fraturada. (a) Métodos contínuos; (b) Métodos contínuos e DEM; (c) DEM; (d) Métodos contínuos ou esquema misto (Brady, 1987).....	2
Figura 1.2 Simulação da deformação e o dano na área perto da escavação da rocha: (a) distribuição do deslocamento (representado em setas); (b) distribuição das fissuras de tração (em vermelho). (Jiang L., 2007).....	4
Figura 2.1 – Discretização de um domínio bidimensional para dois métodos de DEM. Figura adaptada de “Numerical Methods in Geomechanics” (Bobet, 2010).....	9
Figura 2.2 – Modelo mola-amortecedor do contato entre partículas (Figura adaptada de Ferreira, 2009).....	10
Figura 2.3 – Ciclo básico de cálculo do DEM, (modificado de Ayquipa, 2008).....	11
Figura 2.4 – Número de partículas utilizadas em trabalhos publicados feitos com DEM, (O’ SULLIVAN, 2014).....	12
Figura 2.5- Método da triangulação proposto por Cui & O’Sullivan (2003) – modificado.....	16
Figura 2.6- Exemplo de avanço frontal aberto. Morales et al. (2016).....	17
Figura 2.7- Exemplo de avanço frontal fechado. Morales et al. (2016).....	17
Figura 2.8- Método de deposição gravitacional no software STAR CCM+.....	19
Figura 2.9 – Esquema da relação micro-macro. Figura adaptada de Labra (2012).....	23
Figura 3.1- Interação entre duas partículas.....	26
Figura 3.2 – Representação do modelo de contato linear (Figura adaptada de Coetzee & Els, 2008).....	29
Figura 3.3 – Representação do modelo de ligação do software STAR CCM+.....	31
Figura 3.4 – Comportamento força-deslocamento do sistema cimento-grão, modificado de Potyondy (2004).....	33
Figura 3.5 – A relação entre o módulo de elasticidade e a rigidez normal do sistema grão-cimento, (modificado- Itasca ,2008).....	39
Figura 4.1 Partículas compostas em vários formatos.....	42
Figura 4.2 Diferença entre partículas compostas (esquerda) e agrupadas “clusters” (direita).....	42
Figura 4.3 – Modelo utilizado nas simulações numéricas. O cimento da ligação está representado como um cilindro em 3D (Jun Sun, 2013).....	44
Figura 4.4 – Modelo geométrico do cilindro.....	46
Figura 4.5 – Modelo geométrico discretizado mediante o método <i>trimmed mesh</i>	46
Figura 4.6 – Geração da amostra virtual mediante deposição gravitacional.....	47
Figura 4.7 – Modelo virtual com 50.000 partículas.....	48
Figura 4.8 – Amostra final e distribuição do tamanho de diâmetro das partículas.....	48
Figura 4.9 – Rearranjo de partículas.....	49
Figura 4.10 – Variação da resistência à tração σ_t com a relação L/R . (Huang, 1999).....	50
Figura 4.11 – a) Amostra virtual b) Amostra real.....	50

Figura 4.12 – Ensaios com erro, em que o disco de compressão atravessa as partículas.	51
Figura 4.13 – Ensaio com erros utilizando placa de compressão retangular; explosão de partículas.....	51
Figura 4.14 – Ensaio com erros; partículas atravessam as paredes.....	52
Figura 4.15 – Ensaio com erros; incogruência com a física real do ensaio.....	52
Figura 4.16 – <i>overset mesh</i> dos elementos discretizados.	53
Figura 4.17 – Amostra final com <i>overset mesh</i>	53
Figura 5.1 – Modelo DEM com HM/BPM: (a) Seção transversal no meio da amostra, ressaltando o rompimento da mesma; (b) Representação do rompimento da amostra em 3D.	57
Figura 5.2 – a) Gráfico de força <i>versus</i> tempo físico de simulação; b) Plano de medição de deformações c) Número de ligações intactas ; b) Distribuição da resistência das ligações.....	58
Figura 5.3 – a) Curva de força máxima com $\lambda =1.2$; b) Curva de força máxima com $\lambda=1.5$	59
Figura 5.4 – Modelo DEM com contato linear/BPM: (a) Seção transversal no meio da amostra, ressaltando o rompimento da mesma; (b) Representação do rompimento da amostra em 3D.	61
Figura 5.5 – a) Curva de Tensão vs Deformação	62
Figura 5.6 – Ensaio brasileiro. (a) Perspectiva 3D do modelo DEM; b) vista frontal.	63
Figura 5.7 – Ensaio brasileiro: (a) Iniciação das trincas de tração 3D; (b) Início da ruptura; (c) Padrão de ruptura observado na simulação via DEM; (d) Padrão de ruptura observado no teste de laboratório.	64
Figura 5.8 – Curva força <i>versus</i> tiempo no ensaio brasileiro	64
Figura 5.9 – Envoltória de resistencia de Mohr-Coulomb.	65
Figura 5.10 –Relação tensão - deformação obtida experimentalmente a partir do ensaio de compressão simples no granito <i>Lac du Bonnet</i> (Martin & Chandler, 1994).	68
Figura 5.11 –Diagramas tensão-deformação obtidos numericamente do ensaio de compressão simples DEM, mostrando também o número de ligações quebradas.....	70
Figura 5.12 – Curva de resistência a compressão simples <i>versus</i> Módulo de Young das partículas.	73
Figura 5.13 – Curva de deformação máxima <i>versus</i> Módulo de Young das partículas.	74
Figura 5.14 Variação da resistência à tração σt com a relação de diâmetro D_a/D_p . .	75
Figura 5.15 Variação da resistência à compressão simples qu com a relação de diâmetros (D_a/D_p).	76
Figura 5.16 – Variação do Modulo de Young E com a relação de diâmetros (D_a/D_p).	78
Figura A.1 – Simulação com o multiplicador de raio de ligação ($\lambda =1.0$).	90
Figura A.2 –Simulação com o multiplicador de raio de ligação $\lambda =1.2$	90
Figura A.3 – Simulação com o multiplicador de raio de ligação $\lambda =1.5$	90
Figura A.4 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c =40GPa$	91

Figura A.5 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 50\text{GPa}$	91
Figura A.6 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70\text{GPa}$	91
Figura A.7 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 1\text{GPa}$	92
Figura A.8 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 50\text{GPa}$	92
Figura A.9 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70\text{GPa}$	92
Figura A.10 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 40\text{GPa}$	93
Figura A.11 – Curva de tempo utilizado para realizar a simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70\text{GPa}$	93
Figura A.12 – Curva de tempo utilizado para realizar a simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 10\text{GPa}$	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Comparativo dos métodos de empacotamento.	15
Tabela 4.1 – Nomenclatura do modelo constitutivo no STAR CCM+.	45
Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na geração das amostras	49
Tabela 5.1– Resultados experimentais de Martin (1993).	55
Tabela 5.2– Parâmetros microscópicos utilizados na simulação com HM/BPM.....	56
Tabela 5.3– Parâmetros microscópicos utilizados com modelo linear/BPM.	60
Tabela 5.4 – Macropropriedades dos modelos e do Lac du Bonnet granite.....	66
Tabela 5.5 – Influência do tamanho da partícula nas macro-propriedades. Dados de Potyondy (2004).	75

LISTA DE ABREVIACOES E SIMBOLOS

ABREVIACOES

DEM	Discrete Element Method (Mtodo dos Elementos Discretos)
BPM	Bonded particle Model (Modelo de ligao de partculas)
HM	Hertz-Mindlin
PFC	Particle Flow Code
STAR CCM+	Computational Continuum Mechanics
CD-adapco	Computational Dynamics - Analysis & Design Application Company

SMBOLOS

Letras arbicas

A	rea da seco transversal da ligao paralela
c	Ponto de contato
c	Coeso do material
$C_{n,rest}$	Coefficientes de restituio normal
$C_{t,rest}$	Coefficientes de restituio tangencial
d_n	Sobreposio das partculas na direo normal
d_t	Sobreposio das partculas na direo tangencial
D_a	Diametro da amostra
D_{max}	Diametro mximo da partcula
D_{min}	Diametro mnimo da partcula
D_p	Diametro da partcula
E	Mdulo de Young
E_c	Mdulo de Young da partcula
\bar{E}_c	Mdulo de Young do cimento
E_A	Mdulo de Young da esfera A

E_B	Módulo de Young da esfera B
E_{eq}	Módulo de Young equivalente da partícula
e	Porosidade
e_{ijk}	Símbolo de permutação
F_i	Força no contato
\overrightarrow{F}_n	Força normal
\overrightarrow{F}_t	Força tangencial
\overrightarrow{F}_l	Vetor de forças translacionais atuantes na partícula
F_i^c	Vetor de forças atuantes na partícula devido à interação com outras partículas que estão em contato direto
F_i^{ext}	Vetor de forças externas aplicadas nas partículas (fluidos gravitacionais)
F_i^{damp}	Vetor de forças devido ao amortecimento do sistema
\overline{F}_l	Força total transportada pela ligação paralela
G_{eq}	Módulo de cisalhamento equivalente
H	Altura da Amostra
I	Momento de inércia da seção transversal da ligação
I_i	Momento tensorial de inércia da partícula
J	Momento de inércia polar da seção transversal da ligação
k	Rigidez da mola
K_n	Rigidez da mola no sentido normal ao contato
k^{-n}	Rigidez normal por unidade de área no modelo BPM
k^{-s}	Rigidez cisalhamento por unidade de área no modelo BPM
K_s	Rigidez da mola tangente ao contato
\overline{L}	Comprimento
N	Número de partículas
N_c	Número de partículas que estão em contato
N_n	Amortecimento no sentido normal

$N_{n\ damp}$	Coefficiente de amortecimento normal
N_t	Amortecimiento no sentido tangencial
$N_{n\ damp}$	Coefficiente de amortecimento tangencial
n	Vector normal no contato
n_i	Vetor unitário na direção normal que define o plano de contato
m_i	Massa do elemento (partícula)
M_A	Massa da esfera A
M_B	Massa das esferas B
M_{eq}	Massa equivalente da partícula
\bar{M}_i	Momentos transportados pela ligação paralela
q_i^c	Torque devido ao rolamento ou rotação das partículas
q_u	Resistência última
R	Raio da partícula
R_A	Raio da partícula A
R_B	Raio da partícula B
R_{eq}	Raio equivalente da partícula
R^2	Medida estatística acurácia da regressão
\bar{R}	Raio da ligação paralela
T_i	Vetor de torques atuantes na partícula
t	Tempo
t_i	Vetor unitário na direção tangencial que define o plano de contato
T_i	Passo de tempo
u_i	Vetor de deslocamentos
\dot{u}_i	Vetor de velocidades
\ddot{u}_i	Vetor de acelerações
U^n	Sobreposição no sentido normal ao contato
U^s	Sobreposição tangente ao contato
V_i	Velocidade do contato

V_r	Vector de velocidade superficial relativa da partícula
v_n	Velocidade Normal
v_t	Velocidade Tangencial
W	Diâmetro da amostra
$x_i^{(c)}$	Vetor que liga o centro da partícula do i -ésimo elemento com o ponto do contato

Letras Gregas

α^t	Constante de amortecimento
ΔF^s	Incremento da força de cisalhamento elástica
Δt	Passo de tempo
Δt_{cr}	Passo de tempo crítico
ΔU_i	Aumento de deslocamento relativo
ΔU^s	Aumento de deslocamento relativo de cisalhamento
Δx_i	Variação na posição da partícula i no sentido do eixo x
δ_{max}	Máxima sobreposição
ε_a	Deformação axial de aplicação da tensão axial
ε_l	Deformação lateral
ξ	Fracção do amortecimento crítico
$\bar{\lambda}$	Multiplicador do raio de ligação
μ	Coefficiente de fricção
ν	Coefficiente de Poisson
ν_A	Coefficiente de Poisson da partícula A
ν_B	Coefficiente de Poisson da partícula B
ρ	Densidade
σ_i	Tensão na direção i
σ_c	Tensão de compressão
σ_{ci}	Tensão de iniciação da fissura
σ_{cd}	Tensão de dano por fissuras

σ_f	Tensão de pico
$\bar{\sigma}_c$	Resistência à tração do modelo BPM
σ_t	Resistência à tração indireta do material
$\bar{\tau}_c$	Resistência ao cisalhamento do modelo BPM
$\dot{\omega}_i$	Vetor de acelerações angulares da partícula
ϕ	Ângulo de atrito
Ω	Forma da distribuição das partículas
ω_i	Vetor de velocidades angulares da partícula
ω_{max}	Máxima autofrequência do empacotamento

1. INTRODUÇÃO

Na modelagem numérica de problemas de engenharia, alguns deles podem ser representados por um modelo adequado, usando um número finito de componentes bem definidos. Se o comportamento de tais componentes for bem conhecido ou puder ser tratado de forma independente matematicamente, o comportamento global do problema pode ser obtido através das inter-relações entre os componentes individuais (elementos). Tais sistemas são denominados discretos. Um exemplo na engenharia civil de tal sistema discreto é uma estrutura com um número finito de vigas interligadas. A representação e solução de tais sistemas são geralmente simples, tal como na abordagem matricial para as estruturas de viga com funções algébricas que representam o comportamento e suas interações. Para casos que envolvem solos e rochas podem ser considerados os modelos ou teorias tradicionais, introduzindo leis adicionais que reflitam as mudanças na microestrutura do solo ou da rocha, ou melhorando modelos constitutivos baseados nos estudos micromecânicos. Este é o método normalmente utilizado por quem desenvolve modelos constitutivos baseados na mecânica dos meios contínuos (JIANG et al., 2006b).

A grande dificuldade na modelagem de massas rochosas, seja qual for o método numérico, é que a rocha é um material geológico natural e por isso suas propriedades físicas e de engenharia não podem ser estabelecidas ou controladas através de um processo de artificial fabricação tal como para metais ou materiais plásticos. As massas rochosas são em grande parte descontínuas, não homogêneas, anisotrópicas e não elásticas. Por isso este trabalho apresenta outra abordagem alternativa, que trata a rocha como um conjunto de partículas diretamente, enquanto as respostas micro-macroscópicas sob carregamento são obtidas analítica, numérica ou experimentalmente. Este é o método utilizado pelos pesquisadores em micromecânica.

Com o auxílio do Método dos Elementos Discretos (DEM), e através do modelo BPM (*Bonded Particle Model*), pode-se realizar a modelagem micro e macromecânica do comportamento tensão-deformação da rocha. Serão feitos ensaios de compressão simples e ensaios de tração indireta (ensaio brasileiro) para calibrar os parâmetros microscópicos da rocha, com a finalidade de representar o seu comportamento não linear e estabelecer relações entre as suas propriedades macro e microscópicas. Além disso, é possível considerar parcialmente a influência de alguns aspectos sobre o comportamento da rocha normalmente

ignorados pela abordagem tradicional, como o contato entre os grãos, formato das partículas e não homogeneidade na distribuição dos vazios da rocha.

O DEM aparece como um dos métodos mais atraentes para entender o comportamento de rochas ou problemas geotécnicos gerais devido a suas vantagens únicas em lidar com fraturas. A Figura 1.1 ilustra como os métodos contínuos e os métodos de elementos discretos devem ser usados em problemas de mecânica das rochas em diferentes situações de fratura (BRADY, 1987).

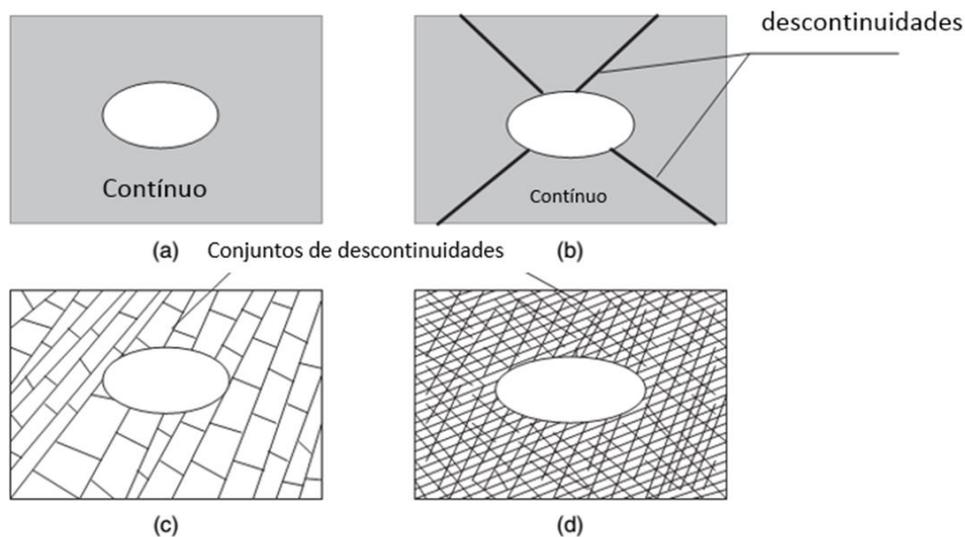


Figura 1.1 Adequação de diferentes métodos numéricos para a análise de uma escavação em uma massa de rocha fraturada. (a) Métodos contínuos; (b) Métodos contínuos e DEM; (c) DEM; (d) Métodos contínuos ou esquema misto (Brady, 1987).

Embora as rochas fraturadas não se pareçam com materiais granulares soltos, sua constituição inclui uma matriz cimentante envolvendo cristais, no caso de rochas magmáticas, ou partículas, no caso de rochas sedimentares detríticas. Portanto, os modelos de materiais granulares podem ser aplicados para investigar o comportamento mecânico quase microscópico de rochas e materiais compósitos (tais como concretos), assumindo que na escala micro ou quase microscópica os materiais podem ser aproximados como conjuntos de partículas de tamanhos muito pequenos ligados entre si por diferentes modelos de contatos ou efeitos de cimentação. Assim, o comportamento mecânico global pode ser avaliado através das contribuições coletivas das partículas em processos de carga ou descarga que exibem movimento, deslocamento, destruição de ligações e re-ligação, deslizamento e rotação interparticular. Os efeitos de aquecimento e a pressão do fluido intersticial também podem ser incluídos em alguns destes modelos e as partículas podem ser rígidas ou deformáveis, com

superfícies lisas ou rugosas de formas diferentes (a maioria com forma circular ou elíptica em 2D e esférica ou elipsoidal em 3D).

Na prática, em muitos modelos de partículas para materiais geológicos, o número de partículas contida em um domínio típico de interesse pode ser elevado, semelhante ao grande número de moléculas que compõe um fluido ou um gás. A Figura 1.2 mostra um exemplo de aplicação do código DEM/PFC2D em processos de fluxo de partículas para simular a deformação e danos microscópicos (como fissuras) em torno de uma escavação de rochas.

O uso de métodos de partículas exige um extenso processo de calibração antes que se possa começar a resolução de problemas de contorno. Em muitos casos, esse processo é mais demorado que a resolução do problema em si. Além disso, métodos discretos geralmente requerem modelos com numerosas partículas, o que os torna computacionalmente intensos e naturalmente lentos. Faz-se necessário, portanto, abreviar a etapa de calibração por meio da formulação de equações que correlacionem o comportamento macroscópico do meio com os parâmetros microscópicos das partículas.

Neste trabalho, assume-se que a rocha se comporta como um material cimentado de grãos complexos, em que o cimento é deformável e pode se quebrar. Tal modelo conceitual pode, em princípio, explicar importantes aspectos do comportamento mecânico das rochas. Vários modelos numéricos têm sido propostos os quais imitam esse sistema com diferentes níveis de fidelidade.

O modelo de partículas cimentadas (referido como BPM) reproduz diretamente este sistema e assim, exibe um amplo conjunto de comportamentos emergentes que representam fielmente os da rocha real. O BPM, combinado com outros modelos de contato, fornece tanto uma ferramenta científica para investigar os micro-mecanismos, quanto para produzir complexos comportamentos macroscópicos.

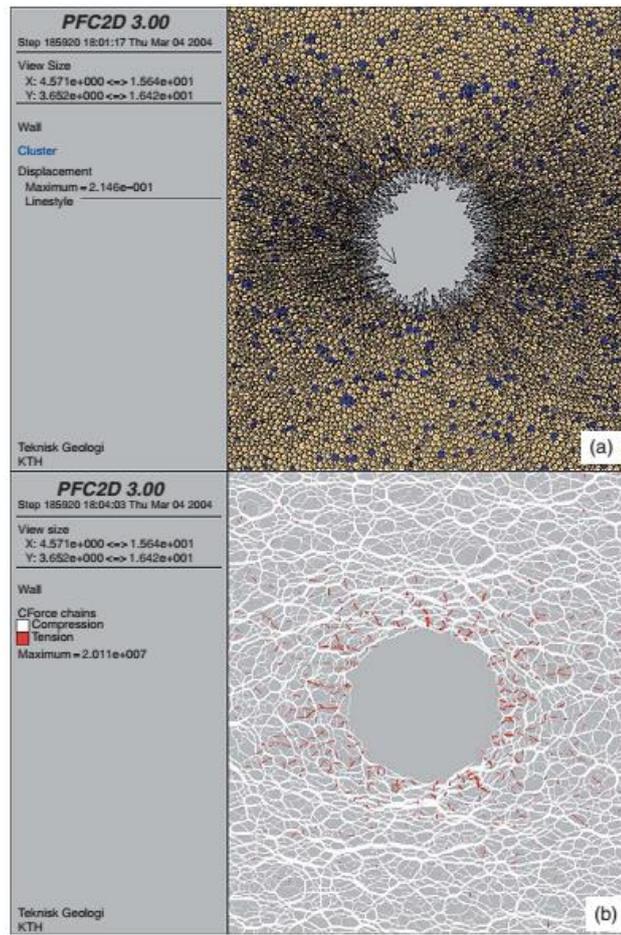


Figura 1.2 Simulação da deformação e o dano na área perto da escavação da rocha: (a) distribuição do deslocamento (representado em setas); (b) distribuição das fissuras de tração (em vermelho). (Jiang L., 2007)

1.1 IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA

O ponto central do presente trabalho está no entendimento da influência das propriedades microscópicas no comportamento macroscópico da rocha modelada. Em outras palavras, o problema principal é a dificuldade de estimar parâmetros dos grãos e das ligações que levem a comportamentos realistas da rocha.

1.2 JUSTIFICATIVA

Como já foi mencionado, a modelagem de materiais granulares, sólidos e rochas tem sido por décadas um tema desafiador de investigação. Os materiais granulares consistem em grãos em contato entre si e dispostos em vazios circundantes. O comportamento mecânico dos

materiais granulares é, portanto, inerentemente descontínuo, heterogêneo e tipicamente anisotrópico.

Esta dissertação visa analisar a resistência e deformabilidade de rochas do ponto de vista da modelagem numérica. Para tanto se pretende utilizar o método dos elementos discretos (DEM) junto com um modelo de cimentação (BPM), por intermédio do software STAR CCM+, de modo a realizar uma simulação otimizada que leve em consideração as físicas envolvidas durante os processos de ensaio de compressão simples e ensaio brasileiro.

Os valores dos parâmetros de entrada a utilizar para a simulação serão obtidos a partir de teses e dados reais utilizados na indústria. A motivação principal desta pesquisa é modelar os processos envolvidos durante os ensaios na rocha, valendo-se do método dos elementos discretos (DEM/BPM). Primeiramente, será abordada uma modelagem das rochas com o modelo de Hertz-Midling como o modelo de contato, em seguida será utilizado o modelo de contato linear.

Este trabalho propõe um avanço no uso da tecnologia DEM, procurando contribuir para uma melhor compreensão desta técnica, especialmente da sua utilização na simulação de rochas. Serão explorados diferentes aspectos do DEM, tais como a estimação de parâmetros ou as técnicas de empacotamento de partículas. Estes aspectos estão fortemente relacionados, pois o comportamento do sistema de partículas depende das configurações iniciais.

1.3 HIPÓTESE

Esta dissertação traz a seguinte hipótese: o comportamento elasto-plástico não linear das rochas pode ser simulado por meio do Método dos Elementos Discretos, levando-se em consideração a sua natureza quase discreta e a interação mecânica entre as partículas que constituem o meio. Acredita-se que o Método dos Elementos Discretos (DEM) em conjunto com o modelo de cimentação BPM seja uma ferramenta numérica adequada para esse estudo, uma vez que ele trata as partículas, e sua interação, de forma individual.

1.4 OBJETIVOS

O objetivo principal de esta pesquisa é contribuir para o entendimento do comportamento de resistência e deformabilidade de rochas sãs, com base na simulação

numérica via DEM/BPM de dois ensaios típicos: compressão simples e tração por compressão diametral.

Pretende-se avaliar o potencial da utilização desta abordagem discreta para reproduzir o comportamento macroscópico de arranjos de partículas, considerando-se as principais variáveis, quais sejam: densidade, módulo dos grãos, ângulo de atrito, força da ligação entre os grãos, etc.

Como objetivos específicos podem ser citados:

- Criar um arranjo adequado de partículas com o STAR CCM+, valendo-se das propriedades elásticas e de resistência previamente conhecidas de rochas reais.
- Gerar um procedimento computacional adequado para os ensaios da rocha especificando as condições geométricas e de contorno para cada caso que será estudado.
- Realizar a simulação dos ensaios em rocha empregando uma velocidade de carga constante durante a execução do ensaio.
- Verificar a possibilidade de modelar e adquirir resultados confiáveis dos ensaios de compressão e tração indireta em rocha usando o método dos elementos discretos (STAR CCM+).

1.5 METODOLOGIA DE PESQUISA

A abordagem da pesquisa é a hipotética dedutiva, e parte da hipótese de que a interação entre as partículas e suas ligações microscópicas influencia significativamente nas propriedades macroscópicas da rocha. Para que se possa comprovar essa hipótese, as seguintes etapas serão realizadas:

- Revisão bibliográfica do Método dos Elementos Discretos (DEM) e das suas leis de contato especificamente o BPM.
- Utilizando o software STAR CCM+ gerar os empacotamentos de partículas a serem estudados com a finalidade de escolher o melhor método de geração de partículas.
- Implementação de uma simulação otimizada (geometria, quantidade de partículas, tempo, etc.) em DEM capaz de simular os ensaios de compressão simples e de tração indireta em rocha.

- Validação dos resultados das simulações no software STAR CCM+ em comparação a resultados experimentais e numéricos encontrados na literatura.

1.6 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação é dividida em seis capítulos apresentando uma breve introdução, uma revisão bibliográfica, a teoria do método dos elementos discretos, a fundamentação Teórica, a obtenção de parâmetros numéricos usando simulações de ensaios de compressão simples e de tração indireta com o programa STAR CCM+, conclusões e sugestões e finalmente as referências bibliográficas.

No Capítulo 2 deste trabalho é resumida a teoria fundamental do método dos elementos discretos e enfocando nas técnicas de discretização.

No Capítulo 3 é apresentada a fundamentação teórica do método dos elementos discretos implementado no software STAR CCM+ enfocando nos modelos de contato e de cimentação usados neste trabalho.

No Capítulo 4 é apresentada uma discussão sobre a modelagem de ensaios de compressão simples e ensaio brasileiro, baseado na preparação da amostra e juntamente com a metodologia seguida para efetuar o cálculo das propriedades elásticas e de resistência para obter os microparâmetros que simulen uma rocha (*Lac du Bonnet granite*) tendo em conta o efeito do carregamento quase-estático e da discretização.

O Capítulo 5 contempla os resultados obtidos durante os testes numéricos, sua análise e comparações feitas com resultados de outros autores.

Finalmente, no Capítulo 6, são expostas as conclusões e feitas algumas sugestões para trabalhos posteriores. Logo após, são listadas as referências bibliográficas.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo está dividido em duas seções principais. Na primeira seção mostra-se uma revisão geral dos principais aspectos do Método dos Elementos Discretos (DEM), com ênfase na discretização do meio. Na segunda são feitas algumas considerações sobre a relação entre parâmetros microscópicos e macroscópicos.

2.1 MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS (DEM)

O método dos elementos discretos (DEM, sigla em inglês para *Discrete Element Method*) é uma técnica numérica que modela um sólido como uma coleção de partículas em forma de discos ou esferas, nas versões mais simples. O método foi desenvolvido originalmente por Cundall (1971) para resolver problemas de mecânica das rochas. Cundall e Hart (1992) mostraram que o DEM é melhor na modelagem de um material descontínuo do que outros instrumentos numéricos, como o Método dos Elementos Finitos. Williams, Hocking e Mustoe (1995) demonstraram que o DEM pode ser visto como uma generalização do Método dos Elementos Finitos (FEM), por meio da transformação do sistema de partículas em uma malha equivalente. As partículas podem se deslocar independente uma da outra e interatuam por meio de seus contatos. A finalidade é determinar o movimento de cada uma das partículas mediante a aplicação das leis do movimento de Newton. As forças que impulsionam o movimento são originadas a partir de forças externas, como a gravidade, e das interações que ocorrem entre pares de partículas em contato.

Ao contrário dos métodos numéricos tradicionais baseados na teoria do meio contínuo, o método dos elementos discretos tem a vantagem de modelar o dano e a fratura frágil simultaneamente, o que acontece como uma consequência genérica da separação das partículas.

Quanto à forma da partícula, esta pode variar de acordo com os requisitos para caracterizar e modelar o meio. Para simular o comportamento de materiais granulares, geralmente trabalha-se com grãos esféricos. São utilizados discos circulares regulares nos casos mais simples de problemas bidimensionais, esferas em caso de problemas granulares 3D. Nas situações em que sejam considerados os efeitos da angularidade, pode-se usar polígonos ou poliedros não regulares. Partículas com formas mais complexas podem ser

simuladas por aglomerações de esferas conhecidas como *clumps*, também chamados de compósitos, agregados ou *clusters* (Figura 2.1).

Para o uso eficiente de uma ferramenta numérica como o DEM é preciso, no entanto, identificar para quais tipos de problemas o seu uso é mais recomendado. O método é mais adequado para lidar com problemas de natureza descontínua e ao mesmo tempo com grandes níveis de deformação. Devido a essas características o DEM tem sido utilizado em problemas de diversas áreas como em aplicações industriais de grande escala (CLEARY, 2004).

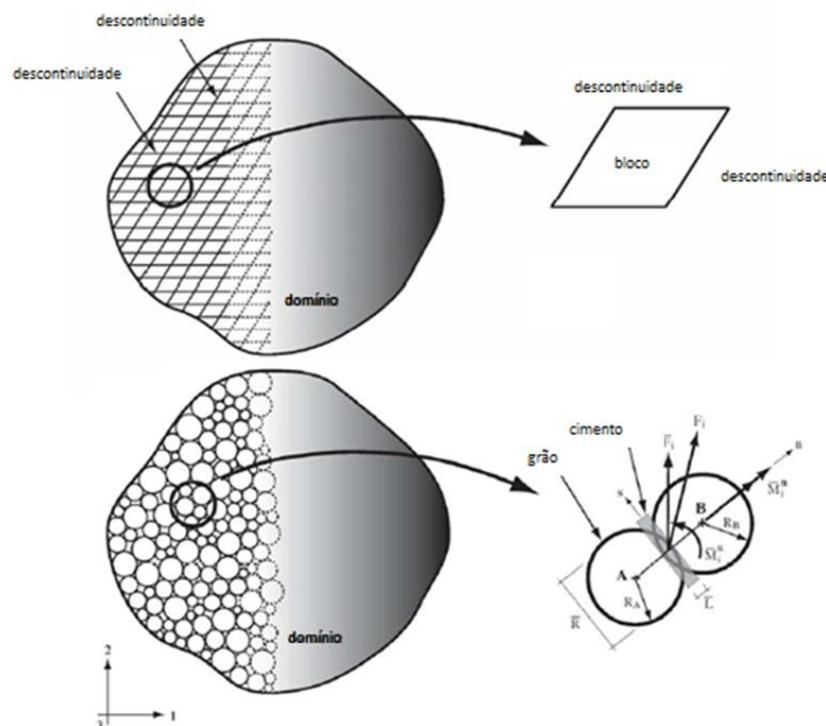


Figura 2.1 – Discretização de um domínio bidimensional para dois métodos de DEM. Figura adaptada de “Numerical Methods in Geomechanics” (Bobet, 2010)

Mais especificamente na engenharia geotécnica, suas funcionalidades têm sido utilizadas em problemas de mecânica das rochas (CUNDALL, 1971; TANNANT e WANG, 2004). A formulação DEM aplicada a problemas de engenharia de rocha foi uma das áreas da mecânica computacional mais rapidamente desenvolvidas. Isto é devido às três questões centrais da abordagem DEM para esse ramo da engenharia aparentemente muito diverso:

(1) Identificação da unidade (blocos de rocha, partículas de material, peças mecânicas ou sistemas de fratura) topologia do sistema;

(2) Formulação e solução de equações de movimento das unidades individuais, incluindo ou excluindo deformação de acordo com a conceituação básica necessária;

(3) A detecção e atualização de contatos (ou conectividade) entre as unidades como as consequências de seus movimentos e deformações.

No campo da mecânica dos solos, o seu uso é bastante variado, como por exemplo, em problemas de localização com grandes gradientes de deformação em meios granulares (KUHN, 2005), comportamento de argilas (YAO e ANANDARAJAH, 2003), interação fluido-partículas (PREECE et al., 1999; COOK et al., 2004), etc.

O DEM especifica propriedades das partículas e dos contatos na micro-escala (Figura 2.2), usando parâmetros como a rigidez nos contatos, a resistência dos contatos, o coeficiente de atrito das partículas, etc. No entanto, na macro-escala, o material é descrito através de constantes elásticas, resistência, etc. Embora não exista uma teoria completa para prever as propriedades na macro-escala a partir da micro-escala e vice-versa, é estabelecida uma relação entre as propriedades micro e macro como pré-requisito em qualquer aplicação do DEM na engenharia.

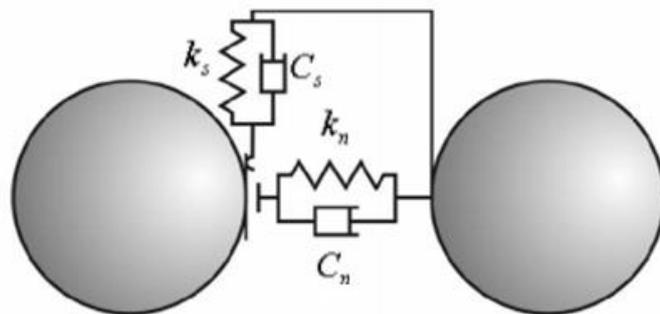


Figura 2.2 – Modelo mola-amortecedor do contato entre partículas (Figura adaptada de Ferreira, 2009).

O'Sullivan (2011), afirma que a simulação progride como uma análise no tempo de um sistema de partículas, mesmo que o sistema de interesse responda de maneira quase estática. Um modelo DEM particulado consiste em um sistema ideal de partículas livres para se mover, conectadas por molas, amortecedores e/ou blocos deslizantes que simulam as interações nos contatos. Os contatos podem se formar entre os corpos e, à medida que o sistema se deforma, esses contatos podem quebrar e novos contatos podem se formar. Normalmente, uma pequena quantidade de sobreposição é permitida no contato entre os corpos, e esta sobreposição é análoga à deformação que ocorre nos contatos entre os corpos reais. Os "modelos constitutivos de contato simples", portanto, são usados para relacionar as forças de contato entre os corpos com a sobreposição de contato.

O ciclo de cálculo do DEM é um algoritmo de passo de tempo (*time stepping*) que consiste na aplicação repetida da lei de movimento em cada partícula, e da lei força-deslocamento em cada contato, além de uma constante atualização na posição de paredes e esferas (Figura 2.3). Contatos, os quais podem existir entre duas partículas ou entre uma partícula e uma parede, são formados e quebrados automaticamente durante a simulação. No início de cada passo de tempo, o conjunto de contatos é atualizado a partir das posições conhecidas de paredes e partículas. A lei de força-deslocamento é então aplicada em cada contato, de forma que sejam atualizadas as forças de contato baseadas no movimento relativo entre duas entidades e o modelo constitutivo de contato. Então, a lei de movimento é aplicada em cada partícula para atualizar a sua velocidade e posição, baseadas nas resultantes de força e momento que emergem das forças de contato e de qualquer força de corpo atuante na partícula. Também são atualizadas as posições das paredes, baseadas na velocidade prescrita nas mesmas. Como esse procedimento é feito para um número grande de partículas, o método é bastante dispendioso computacionalmente, limitando a extensão das simulações. Caso se queira trabalhar com número elevado de partículas, deve-se reduzir a duração virtual da simulação. Por outro lado, se a intenção é simular grandes períodos de tempo, deve-se reduzir o número de partículas. Apesar disso, o número de partículas em uma simulação ainda é bastante limitado, como pode ser visto na Figura 2.4.

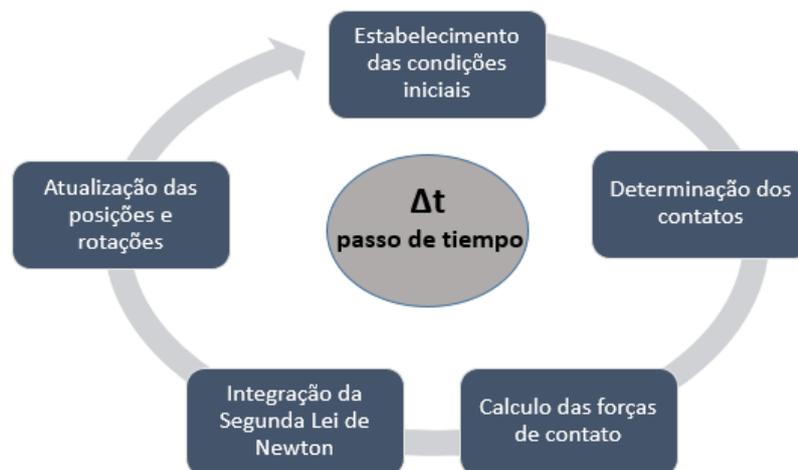


Figura 2.3 – Ciclo básico de cálculo do DEM, (modificado de Ayquipa, 2008)

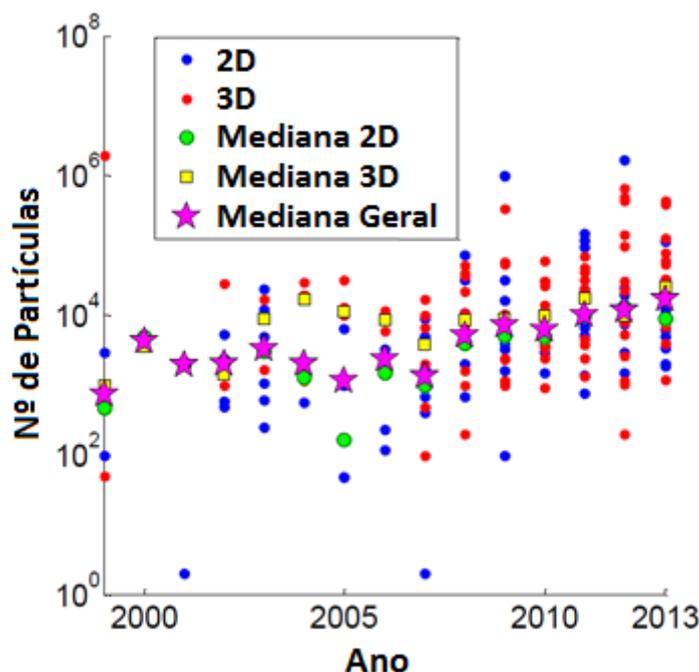


Figura 2.4 – Número de partículas utilizadas em trabalhos publicados feitos com DEM, (modificado-O' SULLIVAN, 2014).

2.1.1 FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

A formulação estabelecida para o desenvolvimento do modelo pelo método dos elementos discretos adota uma série de hipóteses que permitem simplificar o problema real descartando os aspectos menos significativos e permitindo estabelecer um modelo físico e matemático do problema em estudo. As hipóteses que são estabelecidas são as seguintes:

- As partículas são consideradas corpos rígidos.
- O contato acontece num ponto ou numa área muito pequena da interface entre cada partícula.
- No contato existe uma tolerância de penetração entre as partículas, limitada a uma fração do tamanho das partículas. A magnitude da penetração é relacionada com a força de contato através da Lei Força – Deslocamento.
- Todas as partículas têm uma geometria conhecida. Em 2D geralmente são utilizados discos e, em 3D, esferas.

- A geração de um meio empregando elementos discretos deve ser aleatória e os tamanhos dos mesmos devem ser tratados de forma similar (posição e diâmetro dos elementos distintos são aleatórios).

Na formulação podem-se incluir elementos rígidos ou paredes, os quais podem ter velocidade, deslocamentos ou forças prescritas. Estas paredes dão as condições de contorno às partículas, e podem compactar um arranjo de partículas.

O tipo de contorno mais utilizado é a parede rígida. Esse tipo de contorno é feito, em geral, de superfícies planas ou curvas, descritas analiticamente. Essas paredes não possuem inércia e as forças de contato determinadas na interação partícula-contorno são utilizadas somente para atualizar as coordenadas da partícula. Como as forças atuantes na parede rígida não influenciam seu movimento, seu deslocamento é feito por um controle explícito de suas velocidades translacional e rotacional. Quando as paredes são movimentadas, deformações e forças são impostas ao sistema de partículas. Em geral, forças de contato não são desenvolvidas entre paredes rígidas que se interceptam (O' SULLIVAN, 2011). Dessa forma, as posições, orientações angulares e velocidades do contorno são independentes do esquema de integração, e a interação entre contorno e material granular afeta apenas a movimentação do último (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

O movimento de translação e rotação de partículas rígidas (esféricas ou cilíndricas) é descrita por meio da Segunda Lei de Newton da dinâmica do corpo rígido. Para o i -ésimo elemento, tem-se:

$$m_i \ddot{u}_i = F_i \quad 2.1$$

$$I_i \dot{\omega}_i = T_i \quad 2.2$$

onde u_i é o deslocamento do centro da partícula em relação a um sistema de coordenadas (inercial), ω_i é a velocidade angular, m_i a massa do elemento (partícula), I_i o momento de inércia, F_i a força resultante e T_i o torque resultante.

Os vetores força F_i e o torque T_i que atuam na partícula são obtidos através da soma de todas as interações da partícula com o meio.

$$F_i = \sum_{c=1}^{N_c} F_i^c + F_i^{ext} + F_i^{damp} \quad 2.3$$

$$T_i = \sum_{c=1}^{N_c} (x_i^{(c)} \times F_i^c + q_i^c) + T_i^{ext} + T_i^{damp} \quad 2.4$$

Onde F_i^{ext} e T_i^{ext} são forças externas, F_i^c é a força na partícula devido aos contatos pela interação com as demais partículas e os obstáculos, F_i^{damp} e T_i^{damp} são força e torque devido ao amortecimento do sistema, $x_i^{(c)}$ é o vetor que liga o centro da partícula do i -ésimo elemento com o ponto do contato c , N_c é o número de contatos e q_i^c é o torque devido ao rolamento ou rotação das partículas.

2.1.2 DISCRETIZAÇÃO DO MEIO

Uma das fases mais importantes em uma simulação com DEM é a discretização do meio, porque tem uma forte influência nos resultados obtidos nas simulações. Para modelar materiais granulares sem coesão, uma partícula de DEM representa um grão de material, permitindo o uso das propriedades mecânicas. No caso da simulação de materiais sólidos com partículas circulares (ou esféricas) e contatos cimentados, como o caso do BPM, a partícula DEM não tem um paralelo físico, e é apenas uma forma de discretização do meio. Neste último caso, a caracterização do conjunto de partículas está fortemente relacionada com os resultados obtidos e deve ser considerada no processo de calibração ou estimação dos parâmetros do modelo.

Somente recentemente estão em desenvolvimento técnicas de simulação de sólidos reais, eventualmente sem espaços vazios e que reproduzem mais fielmente a estrutura policristalina de rochas e compósitos artificiais como metais e concreto. Em Recarey et al. (2017), é utilizado o método de avanço frontal (veja abaixo) para a simulação destas estruturas policristalinas, com este algoritmo o tamanho das partículas podem seguir qualquer distribuição. Este algoritmo é o mais eficiente dentre os atualmente existentes, porque permite obter empacotamentos com uma alta fração de volume, o que é muito importante no caso destas estruturas.

O empacotamento das partículas utilizado na simulação deve permitir a representação das propriedades mecânicas do material, como isotropia ou coeficiente de Poisson. Para algumas aplicações, como a análise de desgaste de peças mecânicas ou análise de impacto, uma boa taxa de compactação é crucial (HUANG H, 1999, LABRA C, ROJEK J, OÑATE E, & ZARATE F, 2005). Nestes casos, a geração de uma distribuição densa de partículas apresenta um grande desafio.

Existem vários métodos para a geração de empacotamentos e condições iniciais, sendo eles divididos em três classes: dinâmicos, construtivos e algoritmos de rearranjo coletivo. Todos os métodos anteriormente mencionados geram pacotes aleatórios. A Tabela 2.1 mostra um comparativo entre vários métodos de empacotamento. Alguns deles serão descritos em suas respectivas classes.

Tabela 2.1 - Comparativo dos métodos de empacotamento.

Método	Velocidade	Densidade	Controle sobre porosidade	Controle sobre granulometria	Classe
<i>Deposição Gravitacional</i>	<i>Lento</i>	<i>Baixa a Média</i>	<i>Não</i>	<i>Sim</i>	<i>Dinâmico</i>
<i>Geração Aleatória</i>	<i>Variável</i>	<i>Baixa a Média</i>	<i>Não</i>	<i>Sim</i>	<i>Construtivo</i>
<i>Geração Aleatória + Compressão de Paredes</i>	<i>Lento</i>	<i>Média a Alta</i>	<i>Médio</i>	<i>Sim</i>	<i>Dinâmico</i>
<i>Geração Aleatória + Expansão</i>	<i>Rápido</i>	<i>Alta</i>	<i>sim</i>	<i>Não</i>	<i>Dinâmico</i>
<i>Triangulação</i>	<i>Muito rápido</i>	<i>Média a Alta</i>	<i>Não</i>	<i>Não</i>	<i>Construtivo</i>
<i>Avanço Frontal</i>	<i>Rápido</i>	<i>Alta</i>	<i>sim</i>	<i>sim</i>	<i>Construtivo</i>

2.1.2.1 ALGORITMOS CONSTRUTIVOS

Estes tipos de algoritmos enfrentam o problema usando considerações puramente geométricas. Um exemplo é o algoritmo utilizado nos códigos PFC, STAR CCM+, EDEM, onde a posição e o tamanho das partículas são obtidos por um número aleatório. Se ocorrer sobreposição, é obtida uma nova localização aleatória, com o mesmo raio fixo. Esquemas semelhantes são propostos por Lin e Ng (1997) e Evans (1993). Em ITASCA, (1998) é proposta uma modificação alternativa do algoritmo, onde os raios de todas as partículas são expandidos pelo mesmo fator. A geração é interrompida quando os contatos são encontrados. Esses esquemas são chamados de modelos de *Lili-ponds* (HÄAGGSTRÖON, O. e MEESTER, R., 1996).

O modelo proposto por Stienen em STOYAN (1998) utiliza uma localização aleatória para calcular o raio das partículas por metade da distância média das partículas vizinhas. O algoritmo utilizado por CUI e O'SULLIVAN (2003) é chamado de triangulação, em que uma malha triangular é criada com base na triangulação de Delaunay em uma nuvem aleatória de

pontos. A partir dessa malha, são inseridas esferas (discos em 2D) inscritas nos tetraedros (triângulos em 2D). Em seguida, como existem grandes vazios próximos aos vértices dos tetraedros, adicionam-se esferas (círculos em 2D) centradas nos vértices e tangentes à partícula mais próxima. Esse procedimento é exemplificado na Figura 2.5. Suas principais desvantagens são a incapacidade de controle da porosidade e da distribuição granulométrica das partículas, além da formação de empacotamentos não estáveis e pouco densos quando os ângulos das figuras geométricas são inferiores a 30° , podendo apresentar grandes deformações na etapa de estabilização e não preencher o domínio de forma satisfatória.

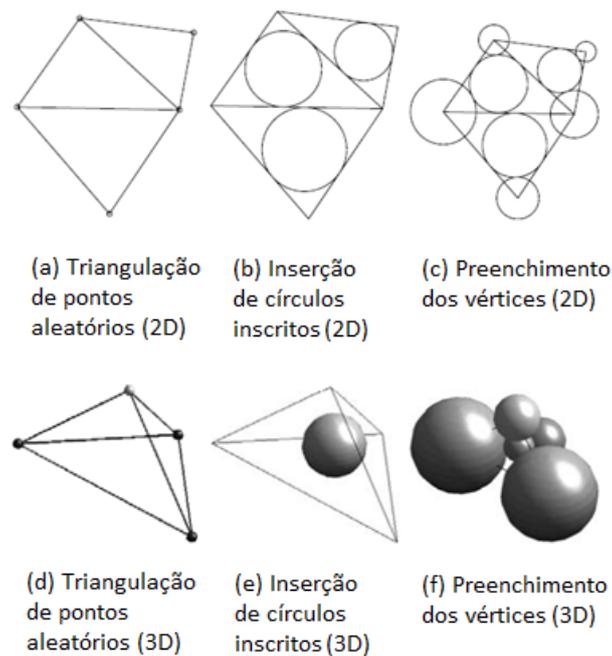


Figura 2.5- Método da triangulação proposto por Cui & O'Sullivan (2003) – modificado.

Mais exemplos desta e de outras técnicas podem ser encontradas em STOYAN (1998). Todos esses métodos utilizam uma localização aleatória e algumas delas podem prescrever uma distribuição de raio. No entanto, os pacotes resultantes apresentam um baixo número de contatos e não podem controlar a porosidade.

Recentemente, foram propostos algoritmos de geração mais sofisticados, baseados em técnicas de avanço frontal, este procedimento foi proposto por FENG *et. al.* (2003). Inicialmente, posicionam-se as duas (três para “3D”) primeiras partículas de forma que elas sejam mutuamente tangentes. Em seguida adiciona-se o próximo disco (esfera para “3D”) tangenciando as duas (três para “3D”) partículas anteriores. Esse procedimento é repetido até que o domínio seja totalmente preenchido. A tangência entre as partículas é garantida pelo Teorema dos Círculos de Descartes (LAGARIAS *et. al.*, 2002). O método foi dividido em

duas abordagens, denominadas de forma aberta e forma fechada. Na forma aberta o empacotamento é construído camada por camada, a partir de uma geometria inicial (Figura 2.6), o primeiro quadrado da esquerda representa o avanço inicial frontal. Na forma fechada o empacotamento cresce de dentro para fora, a partir de uma combinação inicial de esferas (discos) posicionada num ponto interior ao domínio (Figura 2.7).

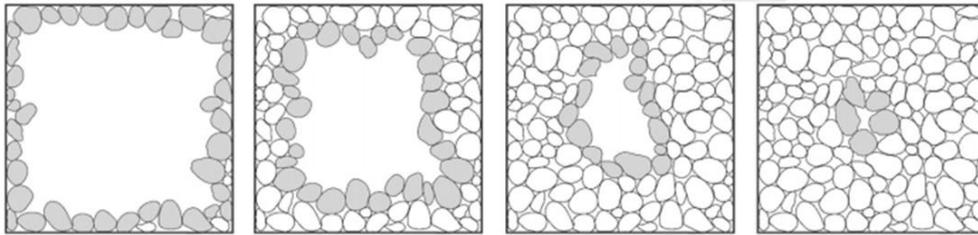


Figura 2.6- Exemplo de avanço frontal aberto. Morales et al. (2016) .

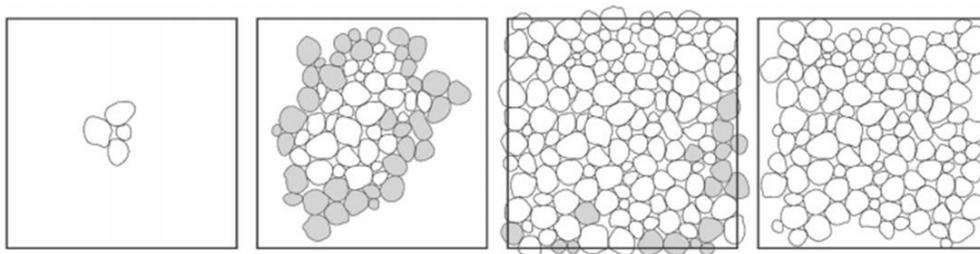


Figura 2.7- Exemplo de avanço frontal fechado. Morales et al. (2016).

Morales et al. (2016a) descrevem a geração de um pacote denso de partículas com tamanhos e formas genéricas. Para obter um pacote denso, cada nova partícula é posicionada de modo que esteja em contato com outras duas partículas, para o caso de simulações bidimensionais, ou três, para simulações tridimensionais. Os problemas dos contatos são resolvidos analiticamente, utilizando a técnica de interseção de envoltória.

Estes autores sugerem uma formulação baseada no esquema de avanço frontal que consiste nos seguintes três passos:

1. Geração da partícula que deve ser adicionada ao empacotamento.
2. Seleção de uma frente ativa e determinação da posição em que a nova partícula está em contacto com outra mais (caso 2D) ou outras duas (caso 3D) que fizeram parte frente.
3. Verificar se a partícula gerada intersecta com outra existente. Se não ocorrer sobreposição a nova partícula é aceita, e continua o ciclo de geração para encher o volume

(3D) ou área (2D). Caso contrário, a posição é rejeitada e retorna-se para o passo 2 até que haja uma frente ativa.

2.1.2.2 ALGORITMOS DINÂMICOS

Outra categoria de técnicas baseia-se nos chamados algoritmos dinâmicos, onde auxiliares externos, como forças de corpo ou simulações do DEM são utilizados, com a finalidade de encontrar melhores valores de densidade. Uma possibilidade é começar com o domínio expandido, e progressivamente as paredes vão se movendo para as posições originais. As partículas são comprimidas para reduzir quaisquer intervalos produzidos pelas posições aleatórias iniciais empurrando os limites em direção às partículas, em uma ou em várias direções. Normalmente, é utilizado o mesmo código DEM para obter um bom empacotamento de partículas rígidas de raio predefinido.

Nos métodos dinâmicos, as simulações iniciais são geralmente realizadas com parâmetros não reais das partículas, sem atrito por exemplo, de forma a acelerar o processo ou facilitar o controle de alguma propriedade do empacotamento. Tão logo o método termine de gerar a amostra, espera-se que o sistema estabilize para tornar os parâmetros das partículas aos seus valores reais; mais alguns ciclos são feitos até que o sistema seja finalmente estabilizado. Um exemplo de método dinâmico é o método da deposição gravitacional (Figura 2.8), o qual tenta replicar a sedimentação. Esse método consiste na geração de subsequentes camadas de partículas até certa altura, permitindo que elas se depositem por ação da gravidade, a qual pode ser magnificada para acelerar a compressão. Esse processo envolve um alto custo computacional e demanda vários passos de tempo até que a amostra gerada esteja estável. É possível que se demore mais para gerar a amostra com esse método do que resolvendo o problema de contorno.

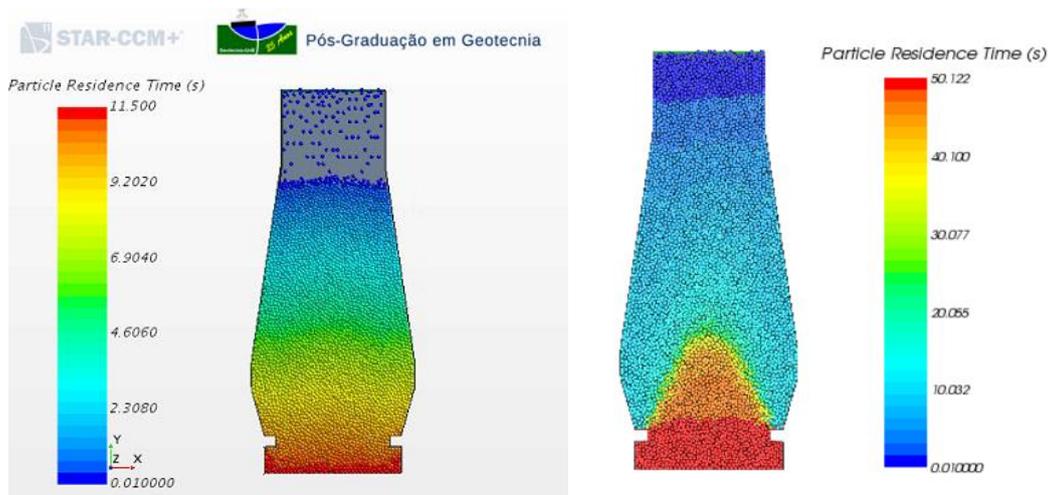


Figura 2.8- Método de deposição gravitacional no software STAR CCM+.

2.1.2.3 ALGORITMO DE REARRANJO COLETIVO

Nestes métodos o domínio é preenchido por um número definido de partículas. As partículas são colocadas aleatoriamente no domínio e as sobreposições são permitidas. Tenta-se reduzir essas sobreposições durante o processo, movendo as partículas gradualmente. De forma semelhante aos algoritmos dinâmicos, os deslocamentos das partículas são calculados a partir das sobreposições com as partículas vizinhas, mas utilizando neste caso apenas ferramentas geométricas ou matemáticas, sem considerar qualquer tipo de variável física, como atrito (LUBACHEVSKY e STILLINGER, 1990). Estes métodos permitem tanto a distribuição do raio como a porosidade desejada, e são mais rápidos do que os algoritmos dinâmicos, porém, mais lentos que o algoritmo construtivo (BARGIEL 2008).

2.1.3 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Para solucionar as equações diferenciais de equilíbrio resultantes da formulação do Método dos Elementos Discretos, é necessário definir qual tipo de técnica deve ser empregada. Métodos explícitos são bastante utilizados em associação com o método dos elementos discretos. Sua principal característica é a obtenção da solução no tempo $t + \Delta t$, considerando-se apenas as condições de equilíbrio do tempo t . Outras características importantes dessa formulação foram apresentadas por Cook et al. (1989), Bathe (1996) e, para o caso da associação com DEM, O'Sullivan e Bray (2004).

Tradicionalmente, os algoritmos explícitos apresentam baixo custo computacional por intervalo de tempo, pois o sistema de equações gerado pela formulação é desacoplado. Não há, portanto, a necessidade de processos iterativos para obtenção da solução no passo de tempo $t + \Delta t$. A maior parte dos códigos de elementos discretos faz uso de uma abordagem de integração no tempo similar ao método das diferenças centrais, com incremento de tempo Δt (O'Sullivan, 2011). Essa abordagem é conhecida como integração *leapfrog*, também é possível encontrar esquemas de integração como a chamada Diferença Central, também referido como o algoritmo *Velocity Verlet* (BATHE, 1976). O software STAR CCM+ utiliza o método de *runge kutta* para sua integração explícita. Na literatura, podem ser encontradas muitas comparações entre os diferentes esquemas onde a estabilidade, precisão e custo computacional são analisados. Alguns detalhes das comparações podem ser encontrados em Kruggel-Emden et al. (2008) e Rougier et al. (2004).

2.1.3.1 AMORTECIMENTO NUMÉRICO

O amortecimento de contato descrito na seção 3.1.1 é uma função da velocidade de contato com os corpos. Ocasionalmente é necessário aplicar amortecimento para partículas sem contato para dissipar sua energia. São considerados dois tipos de amortecimento: de tipo viscoso e não viscoso. Para ambos tipos os termos de amortecimento, forças adicionais, F_i^{damp} e T_i^{damp} , são adicionadas nas equações de movimento (2.3) e (2.4).

No caso do amortecimento viscoso, o valor da força de amortecimento é proporcional à magnitude da velocidade:

$$F_i^{damp} = -\alpha^t m_i \dot{u}_i \quad 2.5$$

$$T_i^{damp} = -\alpha^r I_i \omega_i \quad 2.6$$

Para o amortecimento não viscoso, a força de amortecimento é proporcional à magnitude da força resultante e do momento resultante na direção da velocidade.

$$F_i^{damp} = -\alpha^t \|F_i'\| \frac{\dot{u}_i}{\|\dot{u}_i'\|} \quad 2.7$$

$$T_i^{damp} = -\alpha^r \|T_i'\| \frac{\dot{u}_i}{\|\dot{u}_i'\|} \quad 2.8$$

Onde α^t e α^r são constantes de amortecimento, e F_i' , T_i' estão definidas como:

$$F_i' = \sum_{c=1}^{N_c} F_i^c + F_i^{ext} \quad 2.9$$

$$T_i' = \sum_{c=1}^{N_c} (r_i^c \times F_i^c + q_i^c) + T_i^{ext} \quad 2.10$$

Verifica-se nas equações 2.5 a 2.8 que, tanto no amortecimento não viscoso como o viscoso, os termos são opostos à velocidade e a diferença reside na forma de avaliação da força de amortecimento.

Um equilíbrio quase-estático do conjunto de partículas pode ser alcançado pela aplicação do amortecimento adequado. Este parâmetro deve ser alto o suficiente para obter uma resposta global não-oscilatória para o sistema, porém não deve ser muito alto. Um valor razoável para o amortecimento numérico deve ser próximo do amortecimento crítico para a menor frequência natural do empacotamento, a qual pode ser estimada pelo período de resposta estrutural de um sistema não amortecido (OÑATE & ROJEK, 2004).

Contudo, apesar de o amortecimento numérico compensar uma falha do modelo constitutivo, é difícil escolher um valor que tenha sentido físico ou relacionar os algoritmos utilizados com fenômenos da natureza. A principal forma de dissipação de energia nas simulações com DEM são o deslizamento friccional e a ruptura de contatos (O' SULLIVAN, 2011). No presente trabalho, o amortecimento não viscoso é utilizado, conforme recomendado na literatura.

2.1.3.2 CONSIDERAÇÕES DE ESTABILIDADE NUMÉRICA

A integração explícita no tempo gera alta eficiência computacional e permite a solução de grandes modelos. A desvantagem conhecida do esquema de integração explícito é a sua condição de estabilidade numérica, a qual impõe uma limitação no passo de tempo Δt , isto é:

$$\Delta t \leq \Delta t_{cr} \quad 2.11$$

De forma a garantir estabilidade, o valor crítico para Δt deve ser inversamente proporcional à máxima frequência natural do sistema discreto, independente do tipo de solicitação aplicada ao sistema.

$$\Delta t_{cr} = \frac{2}{\omega_{max}} \quad 2.12$$

Se houver amortecimento, o incremento de tempo crítico é descrito da seguinte forma.

$$\Delta t_{cr} = \frac{2}{\omega_{max}} \sqrt{1 + \xi^2} - \xi \quad 2.13$$

em que ξ é a fração do amortecimento crítico correspondente à frequência mais elevada ω_{max} . O cálculo exato da frequência mais alta ω_{max} requereria solução do problema do autovalor definido para sistema inteiro de partículas rígidas conectadas. O problema do autovalor pode ser definido separadamente para cada partícula rígida (BELYTSCSKO et al. 1985). No caso do DEM, Cundall e Strack (1979) salientam que o incremento de tempo escolhido deve ser pequeno o suficiente para que, durante um único passo de tempo, as perturbações não possam se propagar além da vizinhança de cada partícula. Por esse motivo, os incrementos de tempo utilizados na solução do DEM têm pequena ordem de grandeza, favorecendo o uso de métodos explícitos. A frequência máxima é estimada como o máximo das frequências naturais de sistemas massa-mola definidos para todas as partículas com um grau de translação e um grau de liberdade de rotação:

A frequência natural para cada sistema massa-mola (contato) é definido assim:

$$\omega_i = \sqrt{\frac{k}{m_i}} \quad 2.14$$

onde k é a rigidez da mola e m_i a massa da partícula i . Assim é possível reescrever o passo de tempo crítico como:

$$\Delta t_{cr} = \min 2 \sqrt{\frac{m_i}{k}} \quad 2.15$$

O passo de tempo efectivo é considerado como uma fracção do passo de tempo crítico:

$$\Delta t = \beta \Delta t_{cr} \quad 2.16$$

O valor de β ($0 \leq \beta \leq 1$) foi estudado por diferentes autores. Uma boa revisão pode ser encontrada Em O'Sullivan e Bray (2004), onde os autores recomendam valores próximos de $\beta = 0,17$ para simulação em 3D, e $\beta = 0,3$ para o caso 2D. Valores menos conservadores são apresentados por diferentes autores, conforme recomendado por (ITASCA 1998).

2.2 RELAÇÃO MICRO-MACRO

A relação entre os parâmetros locais e as propriedades mecânicas pode ser definida usando quantidades diferentes que descrevem a configuração local do sistema granular. Para obter o comportamento macroscópico, é necessário o uso dessas grandezas que permitam a análise mecânica do sistema considerando o comportamento no nível micromecânico e a caracterização do sistema das partículas, conforme ilustrado na Figura 2.9.

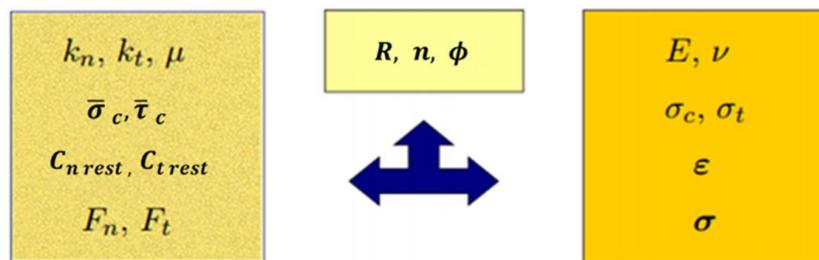


Figura 2.9 – Esquema da relação micro-macro. Figura adaptada de Labra (2012).

Muitos autores investigaram o módulo de Young e o coeficiente de Poisson para modelos específicos de contato. Brandt (1955) considerou a lei de contato Hertz-Mindlin utilizando um empacotamento aleatório de partículas esféricas de diferentes raios. Ele demonstrou que o módulo volumétrico efetivo (K') de uma rocha porosa homogênea e elasticamente isotrópica está relacionado com a pressão de confinamento, porosidade e saturação de líquido. Digby (1981) calculou o módulo volumétrico e o módulo de cisalhamento de uma rocha granular porosa modelada por um empacotamento aleatório de partículas esféricas idênticas utilizando a lei de contato Hertz-Mindlin. Os resultados mostraram que os módulos elásticos dependem da tensão de contato entre as partículas, o número de coordenação, o raio da partícula e o raio de contato.

Autores, como Walton, (1987), Bathurst e Rothenburg (1988), Chang e Misra (1989,1990), mostraram que a relação tensão-deformação pode ser derivada com base em uma abordagem microestrutural contínua para empacotamento aleatório. Chang e Misra (1990) demonstraram que o tensor de módulos de elasticidade que relaciona a tensão-deformação pode assumir várias formas dependendo da simetria das propriedades mecânicas do material granular, e que está intimamente relacionado com a estrutura de empacotamento. O estudo analisa a relação entre a simetria de propriedades mecânicas e a estrutura de empacotamento granular aleatório, usando uma abordagem baseada em micromecânica. A

estrutura de embalagem foi caracterizada pelas funções de densidade de distribuição que foram representadas por expansão de funções harmônicas esféricas. Para o empacotamento aleatório de esferas iguais com uma lei de contato linear, foram obtidos o módulo de Young e o coeficiente de Poisson.

A maior parte das análises teóricas encontradas na literatura mostra que os parâmetros relacionados ao módulo de Young e o coeficiente de Poisson são a rigidez dos contatos (k_n, k_s) , a relação entre a rigidez normal e tangencial $\left(\frac{k_n}{k_s}\right)$, o raio da partícula R , a porosidade (n) , e a distribuição do tamanho das partículas.

As propriedades de resistência não foram estudadas intensivamente. A maioria dos trabalhos não considera coesão, ângulo de atrito interno, ou rotação das partículas. O comportamento de partículas ligadas sob compressão biaxial foi estudado por Donzé et al. (1994) e Hentz et al. (2004) considerou um empacotamento irregular e levou em conta a deformação não linear e os danos.

Trabalhos mais recentes foram realizados no grupo de Geotecnia da Universidade de Brasília. Neves (2009) estudou o comportamento de materiais granulares com o auxílio do software PFC2D, mostrando que na compressibilidade do meio, o formato dos grãos anguloso sobressai com relação aos outros fatores envolvidos, como tensão confinante e coeficiente de atrito entre partículas. O autor também conclui que a porosidade inicial das amostras é de grande importância para a determinação do comportamento do material granular quando cisalhado seja o meio formado por partículas arredondadas ou angulosas.

Zuluaga (2016) afirma que as características microscópicas dos solos, como o tamanho dos seus grãos, forma das suas partículas, granulometria, dentre outros, e os fenômenos micromecânicos relacionados ao solo, como seu grau de saturação, cimentação e quebra, influenciam a sua geomecânica e que a rigidez de alguns materiais será aumentada devido ao efeito de cimentação. Além disso, mostra que o fenômeno microscópico da quebra de partículas relaciona-se também com a distribuição granulométrica do material visto que em materiais mal graduados este fenômeno se dá com maior intensidade.

Albuquerque (2016) demonstrou como o ângulo de atrito das partículas influencia nas respostas de resistência do meio macroscópico para um estudo em estado plano de deformações, observando que o atrito interparticlar leva a um aumento do módulo de Young e do atrito macroscópicos e a uma diminuição do coeficiente de Poisson global.

Tedesco (2016) considerou aspectos muito importantes na realização de ensaio de enrocamentos como a quebra dos grãos, módulo de Young e atrito das partículas. Os resultados mostraram que o principal parâmetro, que controla o comportamento dos ensaios de compressão e cisalhamento, é o módulo de Young da partícula. Tal fato deve-se à dependência entre o cálculo das forças nos contatos e esse parâmetro. Concluiu que para maiores valores de módulo de Young, maiores as tensões necessárias para deformar as amostras.

A finalidade destes tipos de trabalhos com DEM é estabelecer leis de escala que relacionem os parâmetros fenomenológicos de um material na macro-escala (por exemplo, o módulo elástico, a resistência à compressão) aos parâmetros da micro-escala (por exemplo, os parâmetros que caracterizam o contato entre as partículas), e para estabelecer a dependência da resposta macro-escala (por exemplo, como o material atinge à ruptura sob tração) em consequência dos fatores da micro-escala.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEORICA

Neste capítulo serão apresentados os modelos de contato implementados no software STAR-CCM+: o modelo linear, o modelo sem deslizamento de Hertz-Mindlin e os dois modelos de cimentação disponíveis. Também será tratado em detalhe o modelo de cimentação BPM (*Bonded Particle Model*), fundamental para este trabalho.

3.1 MODELOS DE CONTATO

As relações constitutivas para os contatos são compostas por três diferentes modelos: o modelo de rigidez que relaciona o deslocamento com a força de contato, o modelo de deslizamento que forma uma relação entre as forças de contato normal e cisalhante; e o modelo de cimentação que limita as forças de contato totais.

3.1.1 MODELO DE CONTATO SEM DESLIZAMENTO DE HERTZ-MINDLIN

O modelo de contato Hertz-Mindlin é uma variante do modelo de contato mola amortecedor não linear, com base na teoria de contato de Hertz-Mindlin usado para o contato

da modelagem entre as partículas (JOHNSON, 1985 e DI RENZO, 2004). Como complemento ao modelo Hertz, que considera apenas a colisão normal, Mindlin & Deresiewicz (1953) estenderam a teoria da rigidez na direção tangencial.

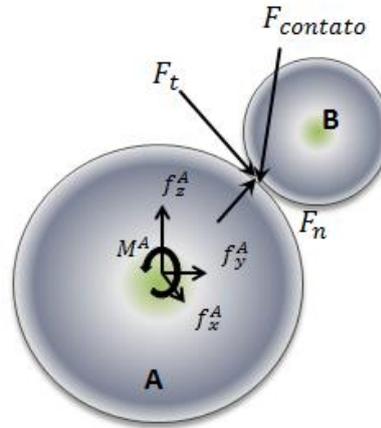


Figura 3.1- Interação entre duas partículas.

As forças entre duas partículas, A e B, Figura (3.1), são descritas pelo seguinte conjunto de equações.

$$\vec{F}_l = \vec{F}_n + \vec{F}_t \quad 3.1$$

em que F_n é o componente de força normal e F_t é o componente de força tangencial.

O comportamento na direção normal é definido pelas equações de força normal (F_n), rigidez normal (K_n) da mola e amortecimento normal (N_n), respectivamente, descritas a seguir:

$$F_n = -K_n d_n - N_n v_n \quad 3.2$$

em que d_n é a sobreposição das partículas nas direções normal no ponto de contato, v_n é a velocidade normal da partícula no ponto de contato.

A rigidez normal K_n do contato pode ser relacionada com as propriedades físicas e geométricas das partículas pela seguinte expressão:

$$K_n = \frac{4}{3} E_{eq} \sqrt{d_n R_{eq}} \quad 3.3$$

em que E_{eq} é o módulo de Young equivalente e R_{eq} é o raio equivalentes. Estas grandezas são calculadas a partir dos valores individuais das partículas em contato.

O módulo equivalente é dado por:

$$E_{eq} = \frac{1}{\frac{1 - \nu_A^2}{E_A} + \frac{1 - \nu_B^2}{E_B}} \quad 3.4$$

e raio equivalente é definido como.

$$R_{eq} = \frac{1}{\frac{1}{R_A} + \frac{1}{R_B}} \quad 3.5$$

onde E_A e E_B são os módulos de Young do material que compõe as esferas A e B, ν_A e ν_B são os coeficientes de Poisson e R_A e R_B são os raios das esferas.

O amortecimento normal (N_n) é calculado da seguinte maneira:

$$N_n = \sqrt{(5K_n M_{eq}) N_n \text{ damp}} \quad 3.6$$

onde $N_n \text{ damp}$ é outra constante de amortecimento definida posteriormente. M_{eq} é a massa equivalente das partículas:

$$M_{eq} = \frac{1}{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \quad 3.7$$

sendo M_A e M_B as massas das esferas A e B.

A força tangencial (F_t) é limitada pela resistência ao deslizamento por atrito de Coulomb no contato. Caso este limite não seja atingido, tem-se:

$$F_t = K_s d_t - N_t v_t \text{ se } |K_s d_t| < |K_n d_n| \mu \quad 3.8$$

em que d_t é a sobreposição das partículas na direção tangencial no ponto de contato, v_t é a velocidade tangencial relativa no ponto de contato, e μ é um coeficiente de atrito estático entre as partículas. K_s é um módulo de rigidez tangente N_t o amortecimento tangencial, definidos posteriormente.

Caso contrário haja deslizamento por atrito entre as partículas, a força tangencial é limitada para:

$$F_t = \frac{|K_n d_n| \mu d_t}{|d_t|} \text{ para } |K_s d_t| \geq |K_n d_n| \mu \quad 3.9$$

Rigidez da mola tangencial na Equação (3.8) é dada por:

$$K_s = 8G_{eq} \sqrt{d_t R_{eq}} \quad 3.10$$

onde G_{eq} é o módulo de cisalhamento equivalente é:

$$G_{eq} = \frac{1}{\frac{2(2-\nu_A)(1+\nu_A)}{E_A} + \frac{2(2-\nu_B)(1+\nu_B)}{E_B}} \quad 3.11$$

O amortecimento tangencial na Equação 3.12 é dado por:

$$N_t = \sqrt{(5K_t M_{eq}) N_{t \text{ damp}}} \quad 3.12$$

Onde $N_{t \text{ damp}}$ é o coeficiente de amortecimento tangencial. Os coeficientes de amortecimento normal e tangencial são dados, respectivamente, por:

$$N_{n \text{ damp}} = \frac{-\ln(C_{n,rest})}{\sqrt{\pi^2 + \ln(C_{n,rest})^2}} \quad 3.13$$

$$N_{t \text{ damp}} = \frac{-\ln(C_{t,rest})}{\sqrt{\pi^2 + \ln(C_{t,rest})^2}} \quad 3.14$$

onde $C_{n,rest}$ e $C_{t,rest}$ são os coeficientes de restituição normal e tangencial, respectivamente. Se $N_{n \text{ damp}} = 1$ então $C_{n,rest} = 0$ e se $N_{t \text{ damp}} = 1$ então $C_{t,rest} = 0$.

Para colisões partícula-parede, as fórmulas permanecem as mesmas, mas o raio da parede e a massa são assumidos como infinito. Portanto, o raio equivalente é reduzido para o raio da partícula e a massa equivalente da parede para a massa da partícula.

3.1.2 MODELO DE CONTATO LINEAR

Este modelo de contato é baseado no trabalho de Cundall e Strack (1979). Neste modelo constitutivo, cada contato é representado por uma mola de comportamento linear no sentido normal e por uma mola linear juntamente com um bloco deslizante no sentido tangencial, Figura 2.8. A rigidez das molas (k_n no sentido normal e k_s no tangencial) junto

com a magnitude da interpenetração são utilizadas para calcular as forças de contato (COETZEE & ELS, 2008). Os modelos de mola-amortecedor incluem um amortecedor viscoso no ponto de contato para levar em conta a dissipação de energia cinética devido às deformações plásticas no contato (O' SULLIVAN, 2011). As forças de contato na direção normal e tangencial estão definidas como nas equações 3.2 e 3.9, mas os parâmetros K_n , K_s , N_n e N_t calculados de forma diferente:

O amortecimento normal N_n é dado por:

$$N_n = 2N_{n,damp}\sqrt{K_n M_{eq}} \quad 3.15$$

$N_{n,damp}$ é o coeficiente de amortecimento normal descrito na equação (3.14) e M_{eq} é a massa equivalente da partícula descrita na equação (3.7).

O amortecimento tangencial é obtido da seguinte forma:

$$N_t = 2N_{t,damp}\sqrt{K_t M_{eq}} \quad 3.16$$

onde $N_{t,damp}$ é o coeficiente de amortecimento tangencial descrito na equação (3.15).

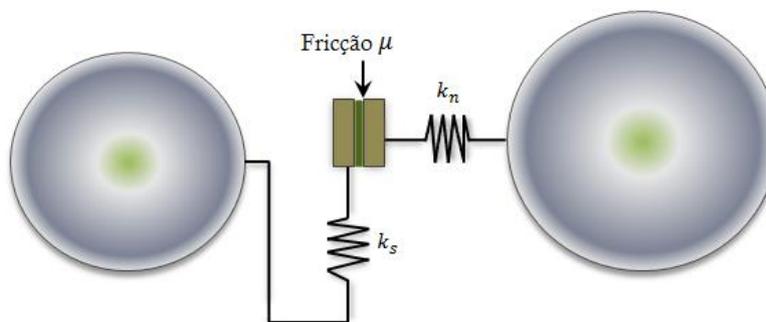


Figura 3.2 – Representação do modelo de contato linear (Figura adaptada de Coetzee & Els, 2008).

Este modelo usa constantes para rigidez de mola normal e tangencial que são baseadas em propriedades da partícula: o raio, a sobreposição máxima e o módulo de Young. O modelo de contato linear é estimado com base no pressuposto de que o modelo linear é um modelo Hertz linearizado. Isto leva à seguinte expressão para as constantes de rigidez normal (K_n) e tangencial (K_s):

$$K_n = \frac{4}{3} \sqrt{\lambda_{max}} E_{eq} R_{eq} \quad 3.17$$

e onde R_{eq} é o equivalente é o raio equivalente definido na equação (3.5)

$$K_s = 8 \sqrt{\lambda_{max}} G_{eq} R_{eq} \quad 3.18$$

onde E_{eq} é o equivalente ao módulo de Young definido na equação (3.4), e a constante λ_{max} é dada por:

$$\lambda_{max} = \frac{\delta_{max}}{R_{eq}} \quad 3.19$$

onde δ_{max} é a máxima sobreposição entre duas partículas.

3.1.3 MODELOS DE CIMENTAÇÃO

Os modelos de cimentação no contato embutidos no STAR CCM + permitem que as partículas sejam ligadas umas às outras nos pontos de contato, criando assim uma espécie de cimentação. Dois modelos de contato estão disponíveis no software, que podem ser vistos como uma cola nos pontos de contato de uma seção transversal circular, Figura 3.3. O primeiro modelo chamado de conexões por contato (*contact bonds*) somente transmite forças entre partículas, enquanto que no segundo modelo denominado de conexões paralelas (*parallel bonds* “BPM”) podem ser transmitidas forças e também momentos entre as partículas. A formulação do BPM será discutida em detalhe na seção 3.2.

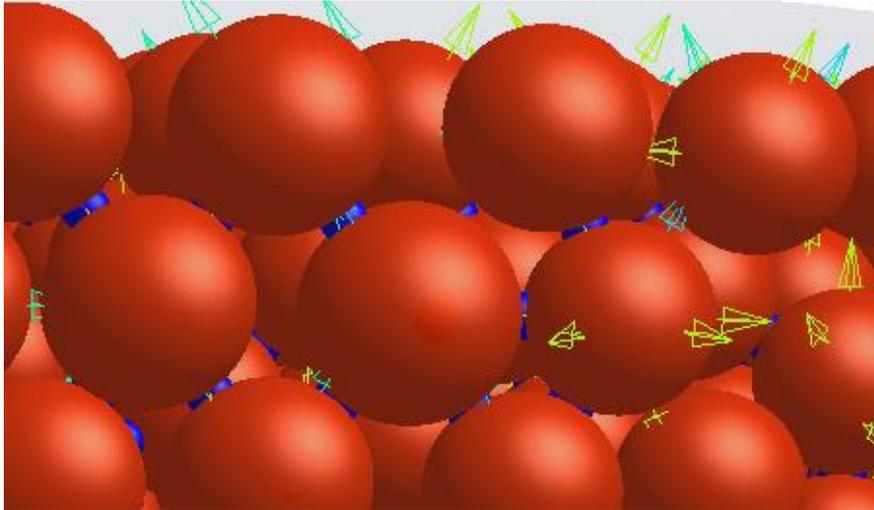


Figura 3.3 – Representação do modelo de ligação do software STAR CCM+

Uma vez que foi estabelecida uma ligação entre partículas, esta permanece até que a resistência da ligação seja rompida. Quando a resistência da ligação é excedida, o contato é apagado, e no caso de as conexões por contato serem apagadas, o modelo de deslizamento é religado especificamente para aquelas partículas.

3.2 FORMULAÇÃO DO MODELO BPM (*BONDED PARTICLE MODEL*)

O modelo BPM simula o comportamento mecânico de uma coleção de partículas rígidas esféricas ou de tamanhos não uniformes que podem ser unidas em seus pontos de contato. O termo "partícula", como aqui é usado, difere da sua definição mais comum no campo da mecânica, no qual é tomado como um corpo de tamanho desprezível que ocupa apenas um único ponto no espaço; No presente contexto, o termo "partícula" denota um corpo que ocupa uma quantidade finita de espaço. As partículas rígidas interagem apenas nos contatos suaves, que possuem rigidez finita normal e de cisalhamento. O comportamento mecânico deste sistema é descrito pelo elemento de cada partícula e pela força e momento atuando em cada contato. As leis do movimento de Newton fornecem a relação fundamental entre o movimento das partículas e as forças e os momentos resultantes desse movimento. As seguintes premissas são inerentes ao BPM.

1. As partículas são corpos rígidos esféricos ou circulares com uma massa finita.
2. As partículas movem-se independentemente uma da outra e podem tanto transladar-se como rodar.

3. As partículas interagem apenas nos contatos, e dado que as partículas são circulares ou esféricas, um contato é composto de exatamente duas partículas.
4. As partículas podem sobrepor-se uma à outra, e todas as sobreposições são pequenas em relação ao tamanho da partícula, de tal forma que os contatos ocorrem sobre uma pequena região (isto é, num ponto).
5. As ligações de rigidez finita podem existir nos contatos, e estas ligações suportam carga e podem quebrar. As partículas num contato ligado não necessitam de sobreposição.
6. As leis generalizadas de deslocamento-força em cada contato relacionam o movimento relativo de partículas à força e ao momento no contato.

A suposição da rigidez das partículas é razoável quando os movimentos ao longo das interfaces representam a maior parte da deformação em um material. A deformação de um conjunto de partículas empacotadas ou de um sistema granular, tal como areia, é bem descrita por esta suposição, porque a deformação resulta principalmente do deslizamento e rotação das partículas como corpos rígidos, e a abertura e intertravamento nas interfaces - não da deformação individual de partículas. A adição de ligações entre as partículas do sistema corresponde à adição de cimento real entre os grãos de uma rocha sedimentar, como no caso do arenito, ou de cimento natural entre os grãos de uma rocha cristalina, como o granito. A deformação de um conjunto de partículas ligadas, ou uma rocha, deve ser semelhante, e ambos os sistemas devem apresentar processos de formação de danos semelhantes sob carga crescente à medida que as ligações são quebradas progressivamente e ambos os sistemas evoluem gradualmente em direção a um estado granular. Se os grãos individuais ou outras características microestruturais são representados como aglomerados de partículas ligadas, então o esmagamento e a não homogeneidade do material em uma escala maior do que o tamanho do grão também podem ser abrangidos por este modelo (ROBERTSON, 2001); POTYONDY, 2001); AUTIO, 2002).

3.2.1 COMPORTAMENTO E PARÂMETROS DO GRÃO – CIMENTO

O modelo BPM imita o comportamento mecânico de uma coleção de grãos unidos por cimento. A discussão a seguir considera cada grão como uma partícula e cada entidade de cimento como uma ligação paralela (*parallel bond*). A força total e o momento que atuam em cada contato cimentado são compostos por uma força, F_i , resultante de uma sobreposição de

partícula-partícula, indicada na Figura 3.4 como o comportamento do grão, e uma força e um momento, \bar{F}_i e \bar{M}_i , carregado pela ligação paralela e denotado como o comportamento do cimento. Estas quantidades contribuem para a força e momento resultante que atuam sobre as duas partículas em contato. A lei força-deslocamento para este sistema será agora descrita, primeiro para o comportamento do grão e depois para o comportamento do cimento. Observe-se que se uma ligação paralela não estiver presente em um contato, então somente a parte do comportamento força-deslocamento baseada no grão ocorre.

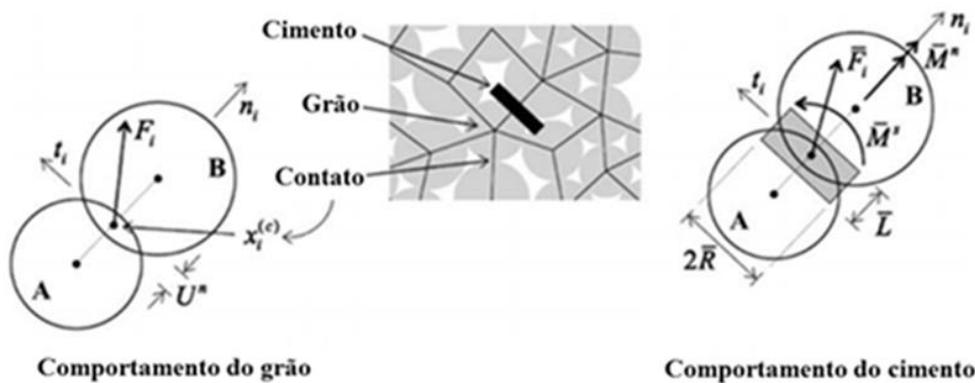


Figura 3.4 – Comportamento força-deslocamento do sistema cimento-grão, modificado de Potyondy (2004).

A parte do comportamento força-deslocamento baseada no grão em cada contato é descrita pelos seguintes parâmetros (Figura 3.4): a rigidez normal e de cisalhamento, K_n e K_s ; o coeficiente de atrito, μ . As duas partículas em contato são assumidas como esferas no STAR CCM+. Sempre que duas partículas se sobrepõem, é formado um contato no centro da região de sobreposição ao longo da linha que une os centros de partículas $x_i^{(c)}$, na Figura 3.4, e duas molas lineares são inseridas (com rigidez derivadas das rigidez das partículas, assumindo que as duas molas das partículas atuam em série) juntamente com um bloco deslizante na direção de cisalhamento.

O vetor de força de contato, F_i (que representa a ação da partícula A na partícula B), pode ser decomposto em componentes normais e de cisalhamento em relação ao plano de contato como:

$$F_i = F^n n_i + F^s t_i \quad 3.20$$

onde F^n e F^s indicam as componentes de força normal e de cisalhamento, respectivamente, e n_i e t_i são os vetores unitários que definem o plano de contato. A força normal é calculada por:

$$F^n = K^n U^n \quad 3.21$$

onde U^n é a sobreposição e K^n sendo a rigidez normal do contato dada por:

$$K^n = \frac{k_n^{(A)} k_n^{(B)}}{k_n^{(A)} + k_n^{(B)}} \quad 3.22$$

com $k_n^{(A)}$ e $k_n^{(B)}$ sendo a rigidez normal de cada partícula.

A força de cisalhamento é calculada de forma incremental. Quando o contato é formado, F^s é zero. Cada aumento subsequente de deslocamento relativo de cisalhamento, ΔU^s , produz um incremento da força de cisalhamento elástica, ΔF^s , que é adicionado a F^s (depois que F^s foi girado para considerar o movimento do plano de contato). O incremento da força elástica de cisalhamento é dado por.

$$\Delta F^s = -k^s \Delta U^s \quad 3.23$$

onde k^s é a rigidez de cisalhamento de contato dada por:

$$k^s = \frac{k_s^{(A)} k_s^{(B)}}{k_s^{(A)} + k_s^{(B)}} \quad 3.24$$

com $k_s^{(A)}$ e $k_s^{(B)}$ sendo a rigidez de cisalhamento das partículas. O incremento do deslocamento relativo durante o passo de tempo Δt é dado por $\Delta U_i = V_i \Delta t$, onde V_i é a velocidade de contato.

$$V_i = \left(\dot{x}_i^{(c)} \right)_B - \left(\dot{x}_i^{(c)} \right)_A \quad 3.25$$

$$V_i = \left(\dot{x}_i^{(B)} + e_{ijk} \omega_j^{(B)} \left(x_k^{(c)} - x_k^{(B)} \right) \right) - \left(\dot{x}_i^{(A)} + e_{ijk} \omega_j^{(A)} \left(x_k^{(c)} - x_k^{(A)} \right) \right)$$

\dot{x}_i e ω_j são as velocidades de translação e de rotação da partícula, respectivamente, e e_{ijk} é o símbolo de permutação. O vetor de incremento relativo de cisalhamento é:

$$\Delta U_i^s = V_i^s \Delta t = (V_i - V_i^n) \Delta t \quad 3.26$$

Se $U^n \leq 0$ (existe uma abertura), então as forças normais e de cisalhamento são ajustadas para zero; caso contrário, o deslizamento é considerado calculando o coeficiente de atrito do contato.

$$\mu = \min(\mu^{(A)}, \mu^{(B)}) \quad 3.27$$

com $\mu^{(A)}$ e $\mu^{(B)}$ sendo os coeficientes de atrito de partículas. A força de cisalhamento é limitada a:

$$F^s = \mu F^n \quad 3.28$$

A parte do comportamento força-deslocamento baseada no cimento em cada contato cimentado é descrita pelos seguintes parâmetros que definem uma ligação paralela (parallel bond), ilustrados na Figura 3.4: rigidez normal e de cisalhamento por unidade de área \bar{k}^n e \bar{k}^s , resistência normal e cisalhante do material cimentante, $\bar{\sigma}_c$ e $\bar{\tau}_c$; e o multiplicador do raio da ligação $\bar{\lambda}$, de tal forma que o raio da ligação paralela é:

$$\bar{R} = \bar{\lambda} \min(R^{(A)}, R^{(B)}) \quad 3.29$$

com $R^{(A)}$ e $R^{(B)}$ sendo os raios das partículas. Uma ligação paralela aproxima o comportamento mecânico de um cimento elástico frágil que une as duas partículas ligadas. As ligações paralelas estabelecem uma interação elástica entre estas partículas, que atua em paralelo com a porção do comportamento força-deslocamento baseada no grão; assim, a existência de uma ligação paralela não impede o deslizamento. As ligações paralelas podem transmitir a força e o momento entre as partículas, enquanto os grãos só podem transmitir força. Uma ligação em paralelo pode ser vista como um conjunto de molas elásticas uniformemente distribuídas sobre uma secção transversal rectangular em 2D e uma secção transversal circular em 3D, situada sobre o plano de contato e centrada no ponto de contato. Essas molas se comportam como uma viga cujo comprimento \bar{L} , na Figura 3.4, se aproxima ao zero para ter um comportamento muito parecido com o das juntas.

A força total e os momentos transmitidos pela ligação paralela são denotados por \bar{F}_i e \bar{M}_i , respectivamente, que representam a ação da ligação sobre a partícula B. Os vetores de

força e momento podem ser decompostos em componentes normais e de cisalhamento em relação ao plano de contato da seguinte forma:

$$\bar{F}_i = \bar{F}^n n_i + \bar{F}^s t_i \quad 3.30$$

$$\bar{M}_i = \bar{M}^n n_i + \bar{M}^s t_i \quad 3.31$$

onde \bar{F}^n, \bar{F}^s e \bar{M}^n, \bar{M}^s denotam as forças e momentos axial e de cisalhamento, respectivamente, e n_i e t_i são os vetores unitários que definem o plano de contato (para o modelo em 2D, o momento de torção, $\bar{M}^n = 0$ e o momento de flexão \bar{M}^s atua na direção fora do plano). Quando a ligação paralela é formada, \bar{F}_i e \bar{M}_i têm valores iniciais igual zero. Cada subsequente deslocamento relativo e incremento de rotação ($\Delta U^n, \Delta U^s, \Delta \theta^n, \Delta \theta^s$ com $\Delta \theta_i = (\omega_i^{(B)} - \omega_i^{(A)}) \Delta t$) produz um incremento da força elástica e momento que são adicionados aos valores atuais (depois que os vectores de componente de cisalhamento foram rodados para ter em conta o movimento do plano de contato). Os incrementos de força e momento elásticos são dados por:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{F}^n &= \bar{k}^n A \Delta U^n \\ \Delta \bar{F}^s &= -\bar{k}^s A \Delta U^s \\ \Delta \bar{M}^n &= -\bar{k}^s J \Delta \theta^n \\ \Delta \bar{M}^s &= -\bar{k}^n I \Delta \theta^s \end{aligned} \quad 3.32$$

onde A, I e J são a área, momento de inércia e momento de inércia polar da secção transversal da ligação paralela, respectivamente. Estas quantidades são dadas por

$$A = \pi \bar{R}^2 \quad \text{para } 3D \quad 3.33$$

$$I = \frac{1}{4} \pi \bar{R}^4 \quad \text{para } 3D \quad 3.34$$

$$J = \frac{1}{2} \pi \bar{R}^4 \quad \text{para } 3D \quad 3.35$$

A tensão normal e de cisalhamento máximas que atuam no contorno da ligação paralela são calculadas a partir da teoria da viga:

$$\bar{\sigma}_c^{max} = \frac{-\bar{F}^n}{A} + \frac{|\bar{M}^s| \bar{R}}{I} \quad 3.36$$

$$\bar{\tau}_c^{max} = \frac{|\bar{F}^s|}{A} + \frac{|\bar{M}^n| \bar{R}}{J} \quad 3.37$$

Se a tensão de tração máxima excede a resistência à tração ($\bar{\sigma}_c^{max} \geq \bar{\sigma}_c$) ou a tensão de cisalhamento máxima excede a resistência ao cisalhamento ($\bar{\tau}_c^{max} \geq \bar{\tau}_c$), então a ligação paralela rompe e é removida do modelo juntamente com a sua força, momento e rigidez.

A forma simplificada do BPM representa o cimento utilizando ligações de contato em vez de ligações paralelas. Uma ligação de contato aproxima o comportamento físico de uma substância de cimento extremamente pequena aderida entre às duas partículas ligadas. A ligação de contato comporta-se essencialmente como uma ligação paralela de raio zero. Assim, uma ligação de contato não tem um raio ou rigidez normal e de cisalhamento, tal como em uma ligação paralela, e não pode resistir a um momento de flexão ou se opor ao rolamento; porém pode resistir a uma força que atua no ponto de contato. Também não é permitido o deslizamento quando uma ligação de contato está presente. A ligação de contato é definida pelos dois parâmetros de resistência à tração e de cisalhamento, R_n e R_t , expressados em unidades de força. Quando o componente correspondente da força de contato excede qualquer um destes valores, a ligação de contato rompe, e apenas é considerada a parte baseada no grão do comportamento força-deslocamento.

3.2.2 CARACTERIZAÇÃO DOS MICRO-PARAMÊTROS

Em geral, o modelo BPM é caracterizado pela quantidade, forma, distribuição do tamanho, empacotamento do grão e micropropriedades do grão-cimento. Cada um desses itens influencia o comportamento do modelo. A densidade do grão, ρ , não afeta o comportamento quasi-estático, mas é incluída para completá-lo. Com o software STAR CCM+, o ponto central são os grãos esféricos compostos por partículas individuais. Os diâmetros das partículas satisfazem a uma distribuição uniforme de tamanhos de partículas delimitada por D_{min} e D_{max} . A construção do empacotamento, ou a conectividade do conjunto de partículas ligadas, é controlada pela razão (D_{max}/D_{min}). Assim como também a distribuição utilizada para a geração do empacotamento. Para uma razão fixa, variando D_{min} , o tamanho da partícula absoluta é alterado, mas sem afetar a construção do empacotamento.

Tal caracterização separa os efeitos da construção do empacotamento e do tamanho de partícula no comportamento do material e identifica claramente D_{\min} como a escala de comprimento de controle do material. O último item que caracteriza o modelo BPM são as micro-propriedades do cimento-grão, expressas pelos seguintes conjuntos de parâmetros:

$$\left\{ E_c, \left(\frac{k_n}{k_s} \right), \mu \right\} \text{ micropropriedades do grão}$$

$$\left\{ \bar{E}_c, \bar{\lambda}, \left(\frac{\bar{k}^n}{\bar{k}^s} \right), \bar{\sigma}_c, \bar{\tau}_c \right\} \text{ micropropriedades do cimento}$$

onde E_c e \bar{E}_c são os módulos de Young do grão e do cimento, respectivamente, $\left(\frac{k_n}{k_s} \right)$ e $\left(\frac{\bar{k}^n}{\bar{k}^s} \right)$, são, nesta ordem, as razões entre as rigidezes normal e ao cisalhamento dos grãos e cimento, respectivamente; $\bar{\lambda}$ é o multiplicador de raio utilizado para definir o raio de ligação paralela definido na equação (3.30); μ é o coeficiente de atrito do grão, e $\bar{\sigma}_c$ e $\bar{\tau}_c$ são as resistências à tração e ao cisalhamento do cimento, respectivamente. Na análise em seguida, os módulos do grão e do cimento estão relacionados com as rigidezes normais correspondentes, de modo que a rigidez das partículas e da ligação em paralelo são atribuídas como:

$$k_n = 2tE_c \quad t = 1 \quad 2D$$

$$k_n = 4RE_c \quad 3D \quad 3.38$$

$$k^s = \frac{k_n}{(k_n/k_s)} \quad 3.39$$

$$\bar{k}^n = \frac{\bar{E}_c}{R^{(A)} + R^{(B)}} \quad 3.40$$

$$\bar{k}^s = \frac{\bar{k}^n}{(\bar{k}^n/\bar{k}^s)} \quad 3.41$$

onde R é o raio da partícula. A deformabilidade de um material elástico linear isotrópico é descrita por duas constantes elásticas. Essas quantidades são propriedades decorrentes do modelo BPM e não podem ser especificadas diretamente. É possível, porém, relacionar os módulos de grão e cimento, E_c e \bar{E}_c , respectivamente, para as rigidezes normais de modo a formar o material de cada contato como uma viga elástica com as suas extremidades nos centros de partículas, como se mostra na Figura 3.5. A rigidez axial de tal como uma viga, é

$K=AE/L$, onde A , E e L são a área da seção transversal, módulo e comprimento, da viga respectivamente. Para o comportamento baseada no grão, tem-se:

$$\frac{k_n}{2} = \frac{(Lt)E_c}{L} \rightarrow E_c = \frac{k_n}{2t}, \quad t = 1 \quad 2D$$

$$\frac{k_n}{2} = \frac{(L^2)E_c}{L} \rightarrow E_c = \frac{k_n}{2L} = \frac{k_n}{4R}, \quad 3D$$
3.42

Assumindo que $k_n = k_n^{(A)} = k_n^{(B)}$, na equação 2.49, para o comportamento baseado no cimento, tem-se:

$$\bar{k}^n A = \frac{A\bar{E}_c}{L} = \frac{A\bar{E}_c}{R^{(A)} + R^{(B)}} \rightarrow \bar{E}_c = \bar{k}^n (R^{(A)} + R^{(B)})$$
3.43

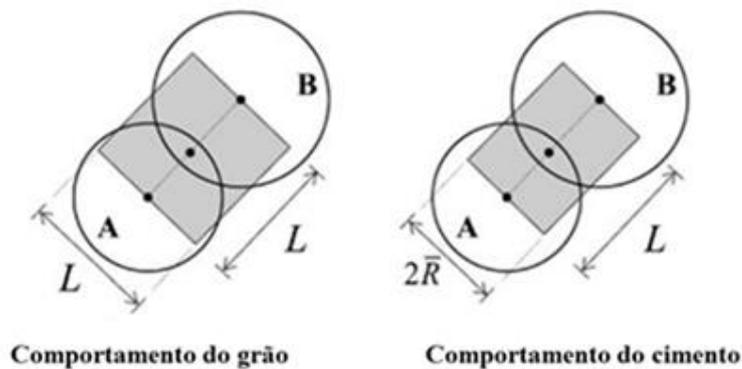


Figura 3.5 – A relação entre o módulo de elasticidade e a rigidez normal do sistema grão-cimento, (modificado- Itasca ,2008)

O módulo do grão depende do tamanho da partícula, e para conseguir um módulo de grão constante, as rigidezes das partículas devem ser dimensionadas com o raio da partícula. Esta análise não produz uma relação entre o coeficiente de Poisson e as rigidezes da partícula no nível micro; entretanto, um coeficiente de Poisson macroscópico será observado, e seu valor será afetado, pelo empacotamento do grão e pelas relações, (k_n/k_s) e (\bar{k}^n/\bar{k}^s) . Para uma forma e um empacotamento de grãos fixos, o aumento dessas proporções aumenta o coeficiente de Poisson (POTYONDY, 2004).

4 METODOLOGIA

O passo mais desafiador no uso do DEM para a simulação de materiais sólidos é a estimação dos parâmetros do modelo. Neste capítulo, será mostrado como foram aplicados os fundamentos do DEM já descritos para atingir os objetivos propostos. Primeiramente, gerou-

se a amostra de rocha por diferentes métodos de discretização com a finalidade de aperfeiçoar a geração do empacotamento da amostra. Posteriormente, realizaram-se simulações numéricas em DEM discutindo aspectos referentes à modelagem do ensaio de compressão simples, tais como a geometria do problema, as propriedades das partículas e paredes, condições de contorno, quantidade de partículas, taxa de carregamento, etc. O principal objetivo é determinar os parâmetros microscópicos que reproduzirão da melhor forma os aspectos macroscópicos da amostra virtual.

4.1 MATERIAL ESTUDADO

Como o DEM representa o comportamento de uma coleção de partículas, as relações constitutivas que descrevem seu comportamento podem ser obtidas a partir da teoria de materiais granulares. Geralmente, essas relações constitutivas são desenvolvidas com base na abordagem de meio contínuo, e não reconhecem a natureza discreta. Para tanto, é necessário saber como o material estudado se comporta de forma macroscópica, tornando possível a calibração dos parâmetros do modelo para que as simulações resultem nos comportamentos esperados.

O material estudado nesta dissertação é uma rocha conhecida como granito do *Lac du Bonnet*, utilizada em simulações feitas por Potyondy e Cundall (2004), com a finalidade de comparar os resultados obtidos das simulações e do laboratório.

4.2 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Para levar a cabo as simulações numéricas, foi necessário estabelecer o software responsável por sua execução. Assim, é possível modelar o problema de contorno no ambiente computacional, utilizando os valores dos parâmetros de entrada, dando início à simulação. As análises feitas com elementos discretos possuem um número elevado de *inputs*, tornando a calibração um processo bastante lento, geralmente sendo a etapa que demanda mais tempo em resoluções de problemas de contorno.

4.2.1 SOFTWARE UTILIZADO

Para a execução das simulações numéricas, optou-se pelo software STAR CCM+ da companhia CD-adapco. O STAR CCM+ é um software para análises e simulações multi-físicas e soluciona problemas de Mecânica dos Fluidos Computacional (CFD), com o auxílio dos últimos avanços em tecnologia CAE, em um ambiente acoplado e com Computação de Alto Desempenho (HPC). O programa é utilizado para resolver problemas em diferentes áreas, como fluxo de calor, esforços nos sólidos em multi-física e projetos em várias disciplinas. O STAR CCM+ inclui preparação do modelo CAD, um gerador de malha (*meshing*) e o pós-processador. As características de STAR CCM+ são:

- Só uma interface de trabalho.
- Análises de multi-físicas.
- Um CAD pronto para gerar malhas com diferentes tipos de técnicas.
- Capacidade de resolver diferentes propriedades físicas de materiais e fluidos.
- Pós-processador com suportes visuais de dados, os quais incluem renderização, visualização 3D, iso-curvas.
- A integração flexível com STAR CCM + na definição das condições de contorno.

A escolha pelo STAR CCM+, foi devida ao fato de ser um software relativamente novo no mercado, mas com grandes capacidades na área de modelagem. No software estão implementados vários algoritmos citados no Capítulo 3. Para a geração das amostras, o software tem os algoritmos de deposição gravitacional e de geração aleatória (com ou sem expansão).

Dentre os modelos de partículas que podem ser utilizados estão as esferas e os cilindros, que são rígidos e sem deformação permanente devido a colisões, ou as partículas compostas. Estas últimas são rígidas, sem resistência à tração (Figura 4.1). No STAR CCM+ a partícula primitiva do DEM é a esfera, por ser ideal para a detecção de contato. Entretanto, há exceções ao que foi exposto anteriormente. É possível a ocorrência de deformações permanentes, criando as partículas a partir de um conjunto de esferas coladas (clusters) caso sejam modeladas de formas diferentes. A Figura 4.2 ilustra a diferença entre as partículas compostas sem deformação e os clusters com deformação, criados em STAR CCM+.

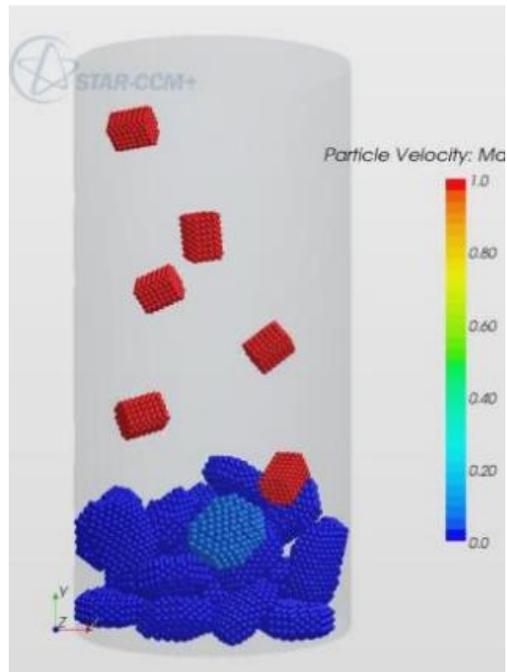


Figura 4.1 Partículas compostas em vários formatos.

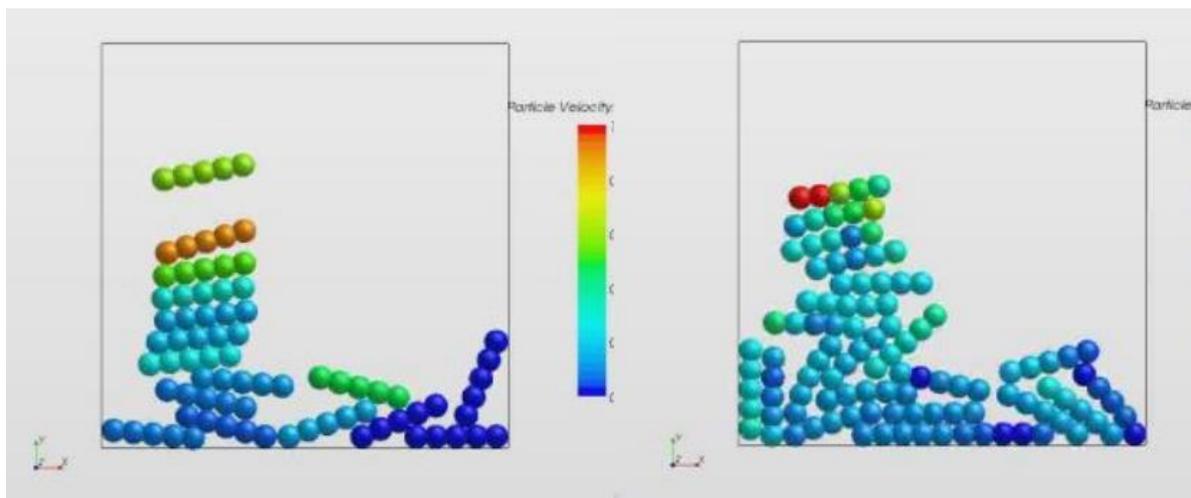


Figura 4.2 Diferença entre partículas compostas (esquerda) e agrupadas “clusters” (direita).

O STAR CCM+ usa uma abordagem de célula hospedeira para detectar colisões. Duas partículas podem colidir apenas se estiverem na mesma célula. STAR CCM+ usa o mais rápido entre seguintes algoritmos de colisão para detectar colisões em qualquer célula particular: o algoritmo NTC (*No Time Counter*) descrito por Schmidt (2000) ou o algoritmo proposto por O’rourke (1981). Também estão disponíveis algoritmos baseados em malhas. Quanto aos modelos de contato implementados no software, que totalizam 13, estão presentes as formulações linear e de Hertz-Mindlin, além de outros que contemplam partículas de concreto, rocha, comportamentos viscosos, inelásticos e modelos definidos pelo usuário,

conseguindo, assim, misturar vários modelos clássicos. O amortecimento numérico utilizado é do tipo não viscoso, e atua diretamente sobre as forças das partículas.

No STAR CCM+, o passo de tempo máximo permitido para uma partícula DEM é limitado pela suposição de que a força que atua sobre uma partícula só é afetada pelos vizinhos imediatos da partícula durante um único passo de tempo.

O passo de tempo final da partícula é determinado como um valor mínimo dos seguintes 3 casos:

1. O passo de tempo é limitado pelo tempo que leva a onda de Rayleigh para propagar-se através da superfície da esfera para o pólo oposto (JOHNSON 1985).

$$T_1 = \pi \frac{R_{min}}{V_{Rayleigh}} \quad 4.1$$

onde R_{min} é o raio mínimo da partícula. A velocidade de onda de Rayleigh depende das propriedades do material, e o valor exato é obtido como uma solução para uma equação secular (Rayleigh, 1885). O STAR CCM+ utiliza uma aproximação da solução que fornece precisão suficiente sem incorrer em alto custo computacional:

$$V_{Rayleigh} = \sqrt{\frac{G}{\rho} \frac{0.87 + 1.12 \nu}{1 + \nu}} \quad 4.2$$

onde G é o módulo de rigidez, ρ a densidade e ν o coeficiente de Poisson da partícula. No STAR CCM+, tem-se um parâmetro chamado “*time scale*”, o qual se encontra predeterminado em um valor de 0.2, o que significa 20% de retardo para a onda de Rayleigh se propagar através da superfície da esfera, com a finalidade de diminuir o passo de tempo.

2. O segundo critério de limitação do passo de tempo, é aplicado nas partículas em movimento. A duração do impacto de duas esferas perfeitamente elásticas assumindo a teoria de contato de Hertz (Timoshenko, 1951) seria:

$$T_2 = 2.94 \left(\frac{5\sqrt{2}\pi\rho}{4} \frac{1 - \nu^2}{E} \right)^{\frac{2}{5}} \frac{R}{\sqrt{V_{impacto}}} \quad 4.3$$

3. A restrição final sobre o passo de tempo da partícula é geométrica. Baseia-se no pressuposto de que as partículas não devem afastar-se muito uma da outra dentro de cada passo de tempo. Esta condição impede que se percam contatos entre partículas-partículas ou partículas-paredes. Portanto, cada partícula é restrita de tal

forma que leva pelo menos 10 passos de tempo para que se percorra todo o comprimento do seu raio.

$$T_3 = \frac{R}{V_{particula}} \quad 4.4$$

Na prática, T_1 é tipicamente o fator limitante, enquanto T_2 e T_3 só restringem as partículas que estão se movendo rapidamente. O módulo de Young do material é ajustado em um valor baixo a fim de acelerar a simulação.

4.2.2 MODELO DE CONTATO E PARÂMETROS DA PARTÍCULA

Como dito anteriormente, o STAR CCM+ conta com 13 tipos diferentes de modelos de contato. Optou-se pelo uso do modelo *Bonded particle* representado na Figura 4.3. Neste modelo as rigidezes das molas são calculadas pela formulação apresentada na seção 3.2. A escolha deste modelo se embasou em dois critérios: o primeiro deles é o fato de representar a resistência do meio mediante as ligações dos contatos, o que propicia a modelagem de rochas de forma mais realista; o segundo é a presença de elementos dissipadores de energia no contato, sendo possível diminuir a magnitude do amortecimento numérico utilizado no sistema. Para esse modelo são necessários os seguintes parâmetros: densidade, módulo de Young, coeficiente de Poisson, coeficiente de atrito, resistência normal e tangencial das ligações e coeficientes de restituição normal e tangencial. Esses parâmetros são apresentados na Tabela 4.1.

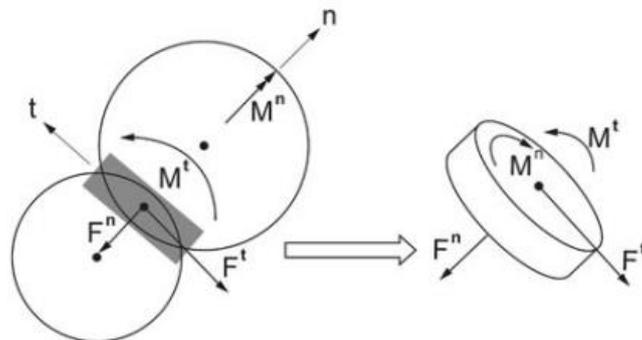


Figura 4.3 – Modelo utilizado nas simulações numéricas. O cimento da ligação está representado como um cilindro em 3D (Jun Sun, 2013).

Tabela 4.1 – Nomenclatura do modelo constitutivo no STAR CCM+.

Propriedade	Unidade	Descrição
D_{min}	mm	Diâmetro mínimo da partícula
D_{max}/D_{min}	-	Relação dos diâmetros das partículas
Ω	-	Forma da distribuição das partículas
ρ	Kg/m^3	Densidade das partículas
E_c	GPa	Módulo de deformação das partículas
ν	-	Coefficiente de Poisson
μ	-	Coefficiente de atrito da partícula
(k_n/k_s)	-	Relação entre a rigidez normal e cisalhante na partícula
$C_{n\ rest}$	-	Coefficiente Normal de restituição
$C_{t\ rest}$	-	Coefficiente Tangencial de restituição
$\bar{\lambda}$	-	Multiplicador do raio da ligação paralela
\bar{E}_c	GPa	Módulo de deformação do contato em BPM
(\bar{k}^n/\bar{k}^s)	-	Relação entre a rigidez normal e cisalhante no contato em BPM
$\bar{\sigma}_c$	MPa	Resistência normal da ligação paralela
$\bar{\tau}_c$	MPa	Resistência cisalhante da ligação paralela

4.2.3 MODELO GEOMÉTRICO

A geometria do sistema deve começar a ser definida por meio das paredes (limites) do modelo numérico. Como ele é tridimensional, definiu-se uma geometria cilíndrica com a finalidade de representar o ensaio real com maior precisão.

O modelo cilíndrico escolhido tem dimensões 60 mm de altura e 30 mm diâmetro, para estabelecer assim uma relação 2:1 (Figura 4.4). Depois da geração geométrica no software STAR CCM+, é preciso fazer uma discretização (malha) da geometria de contono. Dentre os vários métodos de discretização foi escolhido o *trimmed mesh* (Figura 4.5), com base em várias simulações feitas no software, a partir das quais observou-se que, para o DEM, este é o método mais preciso, com convergência mais rápida.



Figura 4.4 – Modelo geométrico do cilindro

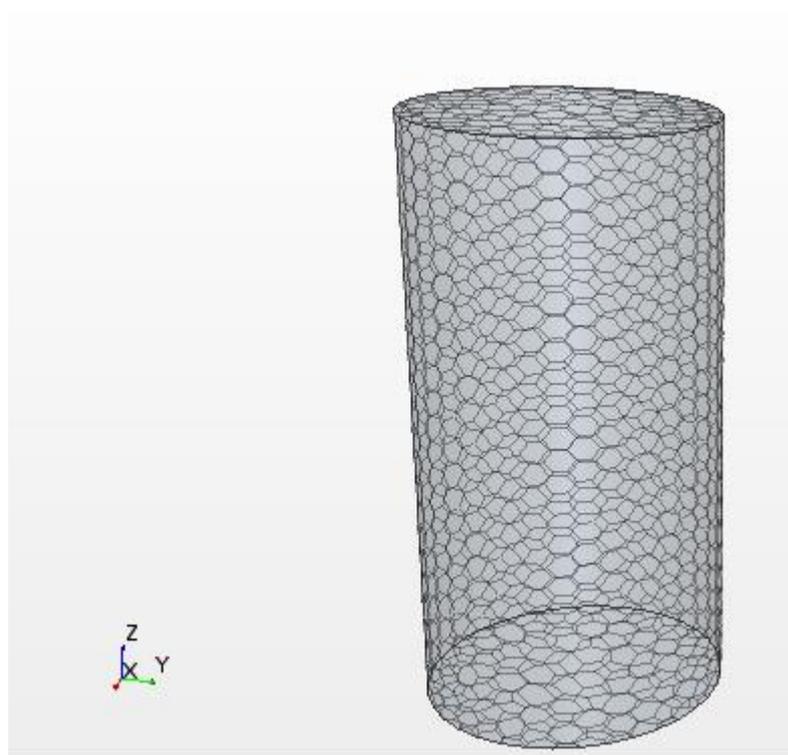


Figura 4.5 – Modelo geométrico discretizado mediante o método *trimmed mesh*.

Vale notar que para o ensaio de compressão simples final foi utilizado um método chamado de “*overset meshing*”, o qual envolve uma geometria um pouco diferente, que vai ser explicada na seção 4.2.6.

4.2.4 GERAÇÃO DA AMOSTRA

Após definir os limites do modelo, é necessário gerar as partículas que formarão parte do meio. No processo de geração da amostra, inicialmente foi utilizado um método de deposição gravitacional, com um diâmetro de partícula estabelecido, como é mostrado na Figura 4.6. Posteriormente foi verificado que o tempo de enchimento (horas ou dias) da amostra era muito alto este método foi descartado.

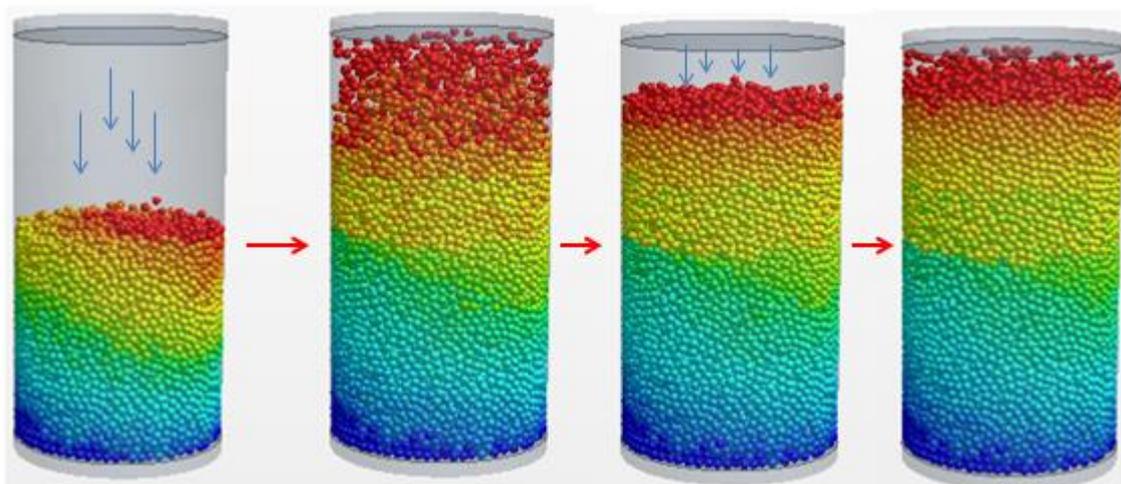


Figura 4.6 – Geração da amostra virtual mediante deposição gravitacional.

Depois foi utilizado um método de geração aleatória de partículas tal que não exista superposição entre partículas. A seguir, os raios das partículas são aumentados até seu valor final e o sistema é liberado para atingir o equilíbrio estático com atrito zero. Os diâmetros das partículas satisfazem a uma distribuição uniforme de tamanhos delimitados por D_{min} e D_{max} , para assegurar um empacotamento inicial razoavelmente denso.

Neste procedimento, primeiramente foi escolhida uma quantidade de 50.000 partículas, como é mostrado na Figura 4.7. Embora o processo de geração aleatória seja muito rápido, independe da quantidade de partículas, para cálculos posteriores como os da compressão, 50.000 partículas é um número significativamente alto, ou que torna as modelagens muito complicadas e demoradas. Por isso, decidiu-se diminuir a 10% a quantidade de partículas.

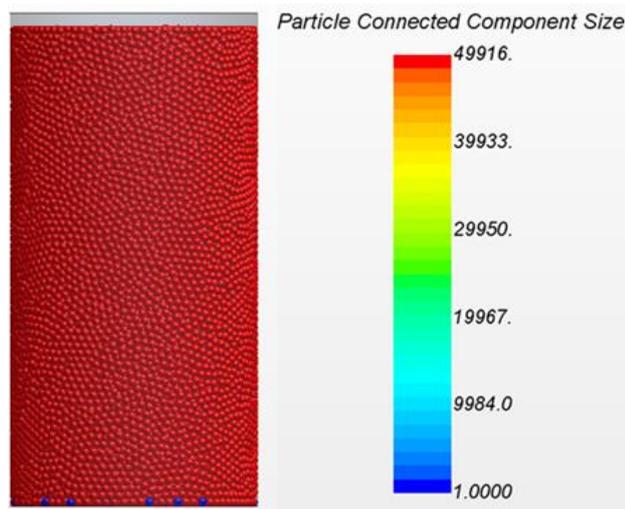


Figura 4.7 – Modelo virtual com 50.000 partículas.

A amostra final foi gerada com 5.000 partículas, utilizando diâmetros aleatórios com uma distribuição normal, como apresentado na Figura 4.8. Os parâmetros numéricos utilizados para essa última etapa de geração estão descritos na Tabela 4.2.

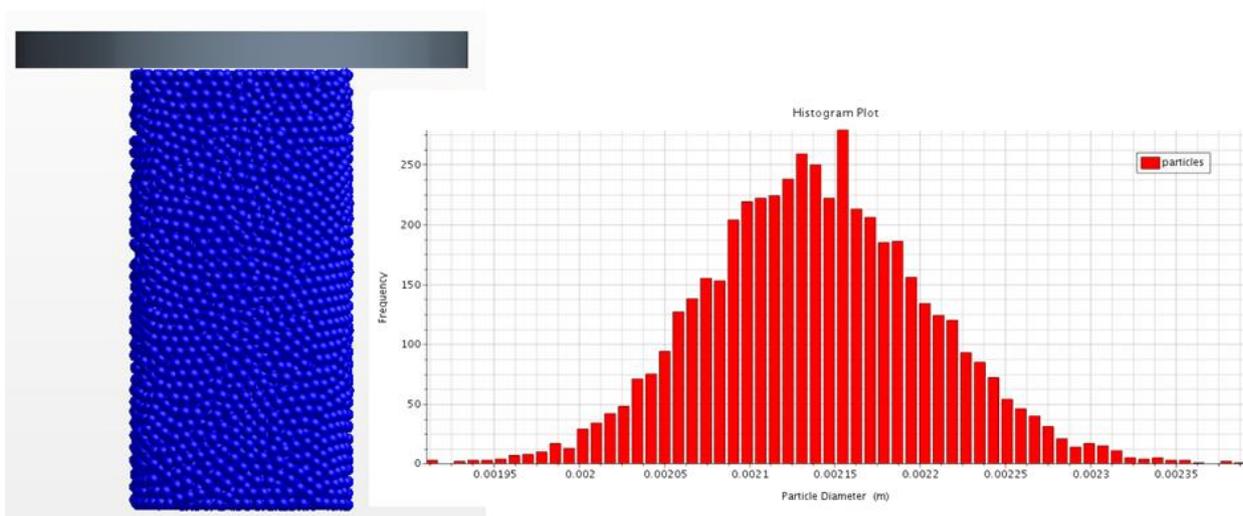


Figura 4.8 – Amostra final e distribuição do tamanho de diâmetro das partículas.

Ao final da etapa da geração, executam-se tantos passos de tempo quanto forem necessários para que o empacotamento se estabilize, gerando assim um bom arranjo de partículas, com a finalidade de diminuir o número de partículas flutuantes (as quais possuem menos de três contatos) de forma a obter uma rede mais densa de contatos, para subsequentemente instalar o modelo de ligação (Figura 4.9). Com esse procedimento, o empacotamento resultante é composto de exatas 5.000 partículas.

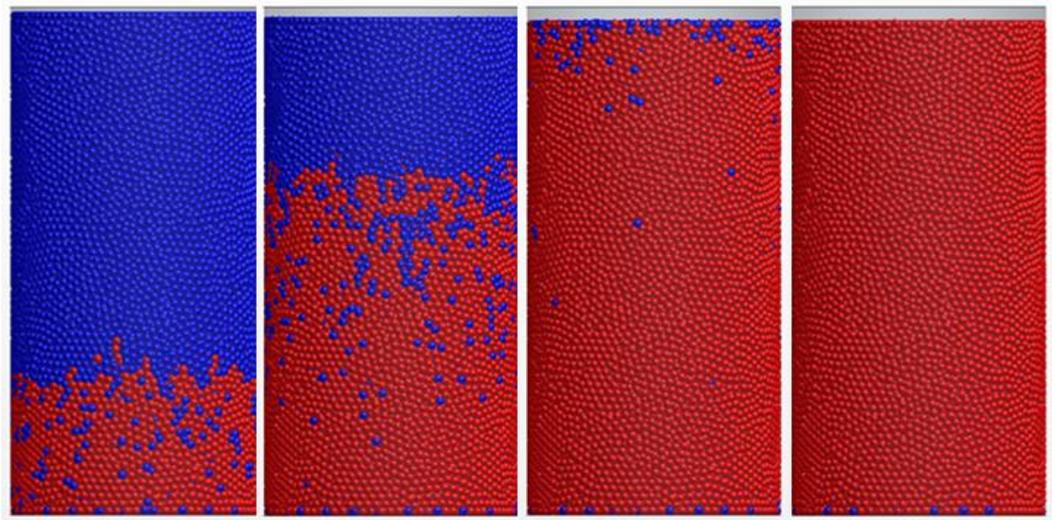


Figura 4.9 – Rearranjo de partículas

Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na geração das amostras

Micropropriedades das partículas			
Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Altura da amostra	L	60	mm
Diâmetro da amostra	W	30	mm
Número de partículas	N	5000	-
Diâmetro mínimo da partícula	D_{min}	1.91	mm
Relação dos diâmetros das partículas	D_{max}/D_{min}	1.252	-
Velocidade das partículas	V_p	-5 em Z	m/s
Coefficiente de fricção estatico partícula-partícula	μ	0.5	-

4.2.5 EFEITO DA DISCRETIZAÇÃO

Durante a preparação da amostra, a relação L/R pode ser considerada como uma medida do grau de discretização, onde L é o comprimento do meio discreto e R é o raio médio das partículas. Somente quando a relação L/R é suficientemente grande, o efeito da discretização na resistência em nível macro pode ser ignorada. Huang (1999) criou dez arranjos de partículas para $L/R = 70, 80$ e 90 , com o mesmo raio médio $R=1,25$ mm e a mesma distribuição $R_{max}/R_{min} = 0,20$ para $L/R = 60$. A Figura 4.10 mostra os resultados dos ensaios à compressão e à tração para as configurações anteriores junto com um teste estatístico com 30 amostras de $L/R = 60$ para obter a seção inicial. Os gráficos mostrados na

figura indicam que para determinar a resistência uniaxial média, o efeito da discretização pode ser ignorado para as razões estudadas.

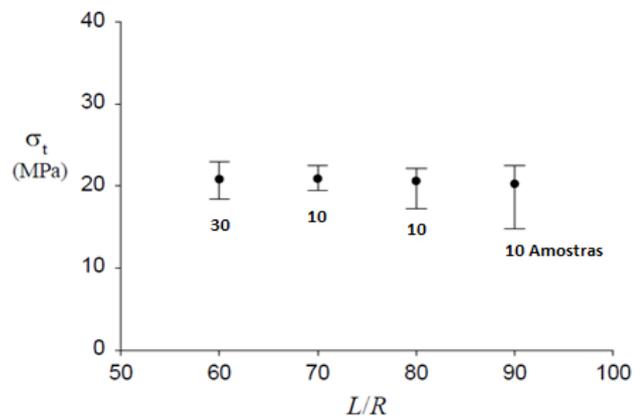


Figura 4.10 – Variação da resistência à tração σ_t com a relação L/R . (Huang, 1999)

4.2.6 ENSAIOS DE COMPRESSÃO SIMPLES

A partir do empacotamento gerado apresentado na Figura 4.8, iniciou-se a bateria de ensaios de compressão simples na amostra virtual. A codificação desses ensaios foi feita com o uso de uma parede móvel superior utilizada para aplicar as cargas. O procedimento é semelhante a um ensaio convencional, em que o corpo-de-prova é carregado por meio da aplicação de velocidade constante na parede superior (Figura 4.11). O ensaio de deformação controlada aplica uma deformação axial numa sequência de estágios.



Figura 4.11 – a) Amostra virtual b) Amostra real

A primeira bateria de ensaios com as condições já mencionadas tiveram problemas, porque ao tentar comprimir o corpo de prova, a parede encarregada da compressão atravessava as partículas do meio, ou as partículas explodiam ou desapareciam, como mostrado nas Figuras 4.12 e 4.13. Para solucionar este problema, decidiu-se por diminuir a velocidade de movimentação da parede correspondente ao disco superior; também se reduziu o passo de tempo de forma significativa até chegar a valores de $1e-12$ seg. Ademais, foram utilizadas diferentes geometrias do disco de compressão com a finalidade de resolver o problema, mas não foram obtidos resultados satisfatórios, por que a física do problema da compressão não era coerente com os ensaios reais.

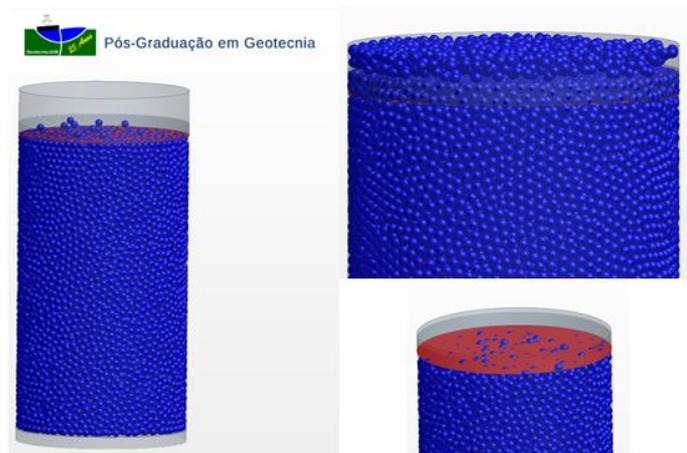


Figura 4.12 – Ensaios com erro, em que o disco de compressão atravessa as partículas.

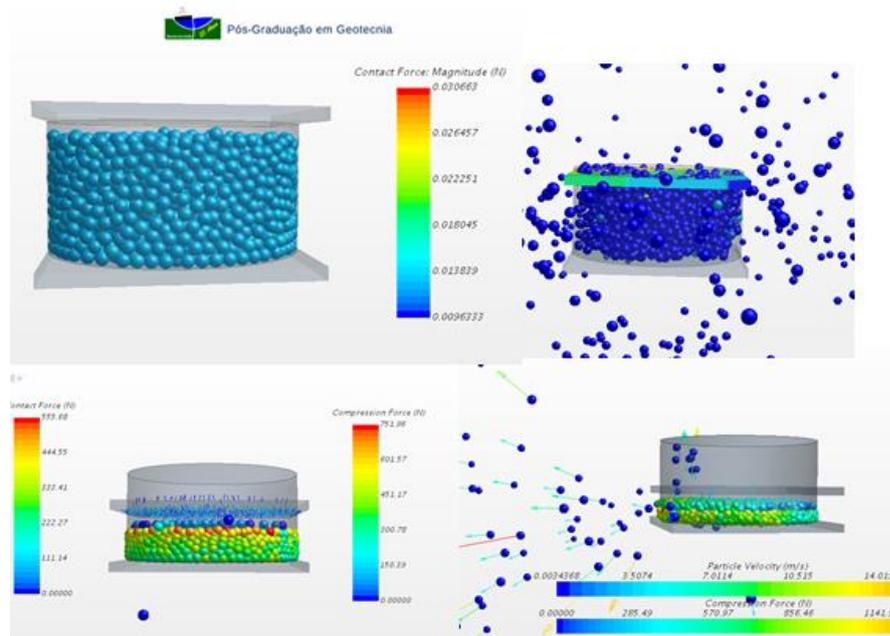


Figura 4.13 – Ensaio com erros utilizando placa de compressão retangular; explosão de partículas.

Em seguida optou-se por utilizar uma ferramenta do software STAR CCM+, o qual consistia em gerar “*interfaces*” entre as paredes e as partículas; esta técnica no começo do ensaio parecia funcionar, mas a amostra não se comportava de forma realista porque a maneira que ela se rompia não correspondia à forma real (Figura 4.14 e 4.15), razão pela qual este método também foi descartado.

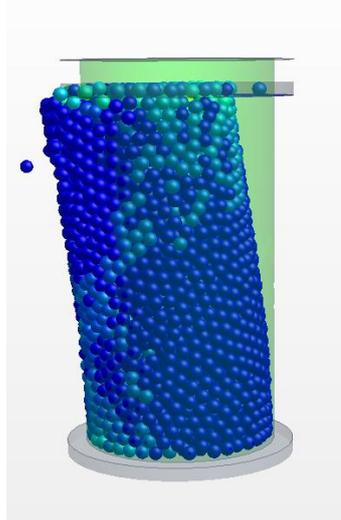


Figura 4.14 – Ensaio com erros; partículas atravessam as paredes.

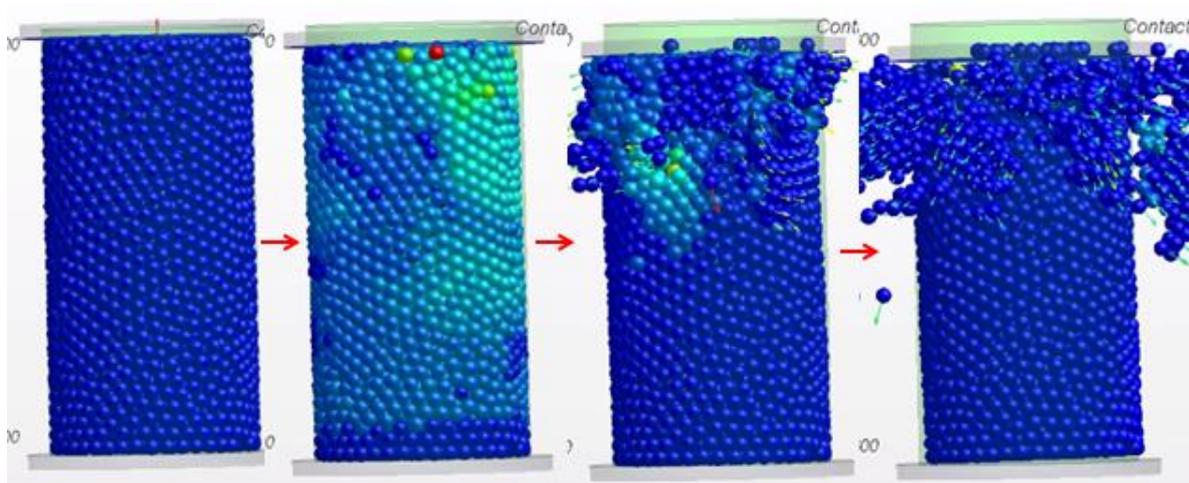


Figura 4.15 – Ensaio com erros; incogruência com a física real do ensaio.

Em função dos resultados insatisfatórios, optou-se por utilizar um método específico do software STAR CCM+ chamado de “*overset meshing*” (sobreposição de malhas). Neste método, primeiramente é gerado um contorno muito maior que o tamanho da amostra. Este contorno foi escolhido também como um cilindro, pois o *overset mesh* requer que os elementos ao serem discretizados sejam compatíveis com a malha de contorno (*trimmed mesh*). Com este método foi discretizado um cilindro externo de dimensões 150 mm de altura

e 150 mm de diâmetro; dentro deste cilindro também é discretizado um disco de dimensões 30 mm de altura e 80 mm de diâmetro que é utilizado como “placa de compressão”, como exibido na Figura 4.16. As partículas são criadas num arquivo diferente de modelagem como foi explicado na seção 3.2.4. Os diâmetros e as posições (x,y,z) das partículas deste corpo de prova são extraídos numa tabela para depois serem importados num arquivo onde se tem o *overset meshing*, como é mostrado na Figura 4.17.

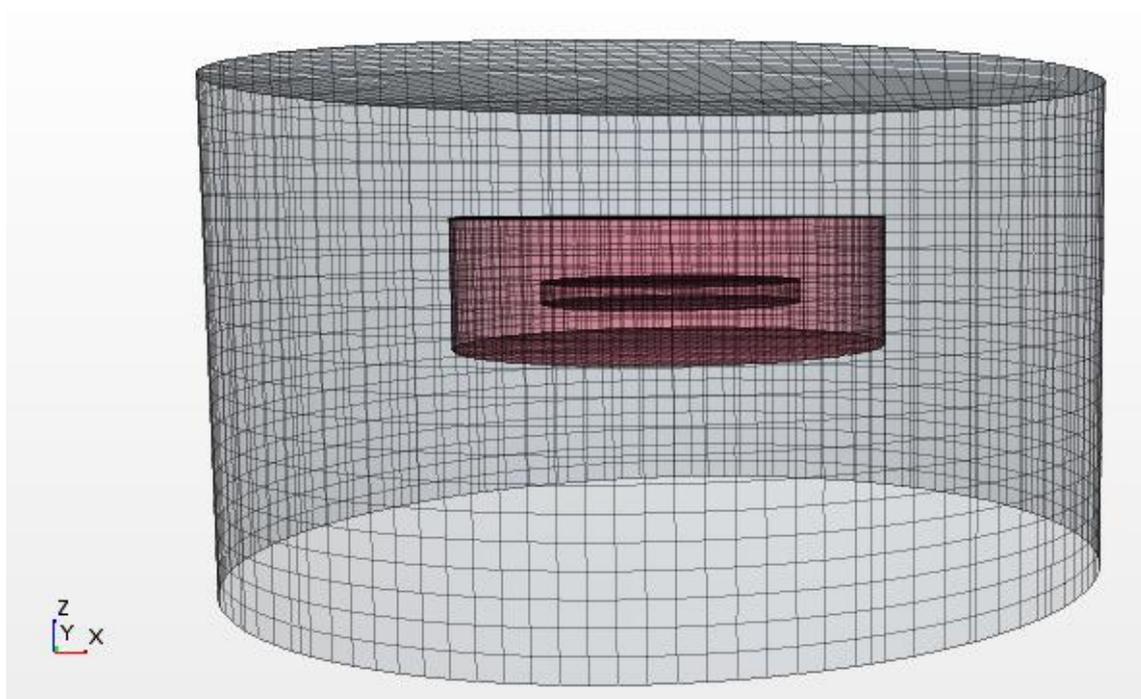


Figura 4.16 – *overset mesh* dos elementos discretizados.

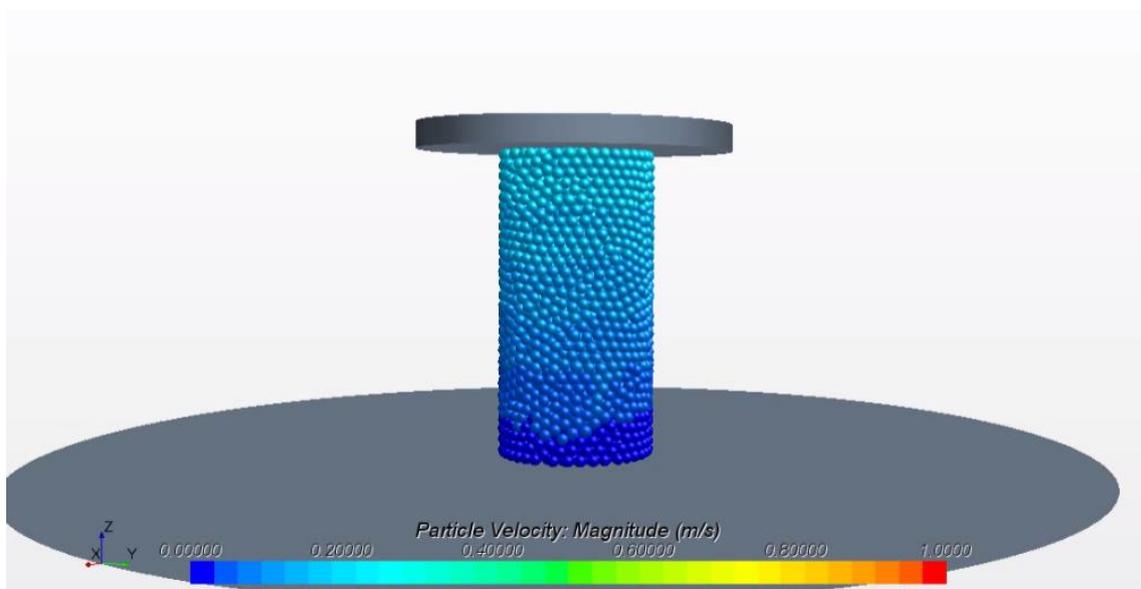


Figura 4.17 – Amostra final com *overset mesh*.

4.2.7 TAXA DE CARREGAMENTO

As respostas obtidas com uma simulação via DEM e um material real são sensíveis à taxa de carregamento. Na maioria dos casos, escolhe-se uma taxa de carregamento que seja suficientemente pequena para garantir a solução quase estática. A resposta quase estática é obtida quando o carregamento for suficientemente lento para que as partículas se adaptem à redistribuição das forças não lineares que acompanham cada caso.

Esta resposta pode ser obtida simulando o ensaio sob deformação controlada, onde as velocidades dos muros são redefinidas como zero após cada evento não linear até atingir um novo estado de equilíbrio. Desta forma, pode-se traçar uma curva tensão-deformação completa. Pode-se garantir que uma condição quase-estática foi obtida, realizando-se o ensaio com diferentes taxas de deformação com velocidades constantes mostrando que a resposta é a mesma para todas as velocidades abaixo de um valor de velocidade crítico.

Uma vez que o modelo DEM esteja calibrado, pode-se comparar a resposta quase-estática numérica com a resposta quase-estática obtida de um ensaio real. Se os efeitos dinâmicos afetarem a resposta do sistema real, então estes efeitos também devem ser incluídos no modelo DEM, o que envolve uma maior complexidade no processo de calibração para igualar os mecanismos de dissipação que ocorrem no material real. Se forem comparadas somente respostas quase-estáticas, então os mecanismos de dissipação não devem ser incluídos no modelo DEM.

Usualmente os ensaios de compressão reais são realizados no regime quase-estático, onde as velocidades são suficientemente pequenas para que os parâmetros de inércia não afetem os resultados. Assim, a taxa de deformação tem que ser definida com um valor o mais baixo possível. No entanto, para obter uma resposta com um tempo computacional razoável usando o STAR CCM+, é necessário sacrificar este valor usando uma maior taxa de deformação. Quando se aumenta a taxa de deformação, as curvas da resposta tensão-deformação apresentam oscilações e efeitos dinâmicos que podem afetar o comportamento do ensaio.

5 RESULTADOS E ANÁLISES

Neste capítulo serão apresentados e analisados os resultados das simulações numéricas, e os valores dos parâmetros macroscópicos calculados para as amostras serão comparados com resultados da literatura.

A rocha padrão para efeitos de comparação é um granito, conhecido na literatura como *Lac du Bonnet granite*, o qual foi testado em laboratório sob compressão simples, tração indireta por Martin (1993) e Martin e Chandler (1994). Também foram realizados ensaios triaxiais convencionais. A Tabela 5.1 mostra um resumo estatístico das principais propriedades macroscópicas obtidas estes autores com uma bateria de ensaios experimentais que inclui 81 amostras em alguns ensaios.

Tabela 5.1– Resultados experimentais de Martin (1993).

Propriedade	Lac du Bonnet granite
E (GPa)	69 ± 5.8 ($m = 81$)
ν	0.26 ± 0.04 ($m = 81$)
q_u (MPa)	200 ± 22 ($m = 81$)
σ_{ci} (MPa)	$90 + \sigma_3$, $\sigma_3 < 30$
σ_{cd} (MPa)	150 , $\sigma_3 = 0$
σ_t (MPa)	9.3 ± 1.3 ($m = 39$)
ϕ (deg)	59
c (MPa)	30

A qualidade dos dados publicados tem sido explorada em diversos trabalhos numéricos, como em Potyondy (2004), onde estes ensaios foram simulados usando os softwares PFC2D e PFC3D. O objetivo deste capítulo é reproduzir os resultados experimentais, usando modelos de contato e cimentação adequados e disponíveis no software STAR CCM+.

Primeiramente será mostrada uma calibração inicial para determinar o melhor modelo, com base nas simulações do ensaio de compressão simples. Uma vez escolhido o modelo, serão mostrados os resultados qualitativos dos ensaios de compressão simples e tração indireta, usando o mesmo conjunto de parâmetros. Em seguida os resultados são discutidos quanto aos aspectos quantitativos dos parâmetros macroscópicos calculados. Finalmente mostra-se uma análise paramétrica da influência do módulo de Young das partículas e do tamanho dos grãos em uma amostra de tamanho fixo.

5.1 SIMULAÇÕES PRELIMINARES - COMPRESSÃO SIMPLES

Inicialmente foram feitas simulações do ensaio de compressão simples, conforme detalhado no capítulo anterior, com o objetivo de averiguar o melhor modelo de contato/cimentação. No primeiro caso, foi empregada a lei constitutiva de Hertz-Mindlin (HM) junto com o modelo de cimentação BPM. A Tabela 5.2 apresenta os parâmetros utilizados. Estes valores foram inicialmente definidos com base nos parâmetros utilizados por Potyondy (2004). A densidade e o coeficiente de Poisson das partículas representam valores experimentais. Para o amortecimento é difícil escolher um valor que tenha sentido físico e foram testados valores de coeficiente de restituição no intervalo de 0.1 a 0.3 com a finalidade de obter altos valores de amortecimento e respostas não oscilatórias para o sistema. Para este intervalo não houve mudanças significativas nas respostas no nível macro. O módulo Young de 10 GPa foi escolhido de modo a viabilizar computacionalmente as análises.

Tabela 5.2– Parâmetros microscópicos utilizados na simulação com HM/BPM.

Micropropriedades das partículas			
Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Diâmetro mínimo da partícula	D_{min}	1.91	mm
Relação dos diâmetros das partículas	D_{max}/D_{min}	1.252	-
Densidade	ρ	2630	Kg/m ³
Módulo de Young das partículas	E_c	10	Gpa
Coeficiente de Poisson	ν	0.256	-
Coeficiente de atrito da partícula	μ	0.5	-
Coeficiente normal de restituição	$C_{n\ rest}$	0.3	-
Coeficiente tangencial de restituição	$C_{t\ rest}$	0.3	-
Micropropriedades da ligação			
Multiplicador do raio da ligação paralela	$\bar{\lambda}$	1	-
Resistência normal da ligação paralela , média	$\bar{\sigma}_{c,mean}$	175	Mpa
Resistência normal da ligação paralela , desvio	$\bar{\sigma}_{c,std}$	40	Mpa
Resistência cisalhante da ligação paralela cisalhante, média	$\bar{\tau}_{c,mean}$	175	Mpa
Resistência cisalhante da ligação paralela , desvio	$\bar{\tau}_{c,std}$	40	Mpa
Velocidade da compressão	v_{comp}	0.2	m/s
Implicit time step	-	1×10^{-4}	seg
Time scale do DEM solver	-	0.2	-

A Figura 5.1 ilustra a ruptura da amostra através de um corte transversal (a) e de uma vista tridimensional (b). Percebe-se a separação do corpo de prova em duas zonas. A parte vermelha inferior permanece relativamente intacta. Nota-se uma superfície de ruptura com algum desvio em torno de 60°. Há também uma intensa fragmentação do bloco superior, com o estilhaçamento da amostra o que indica um comportamento pós-pico muito frágil e pouco representativo.

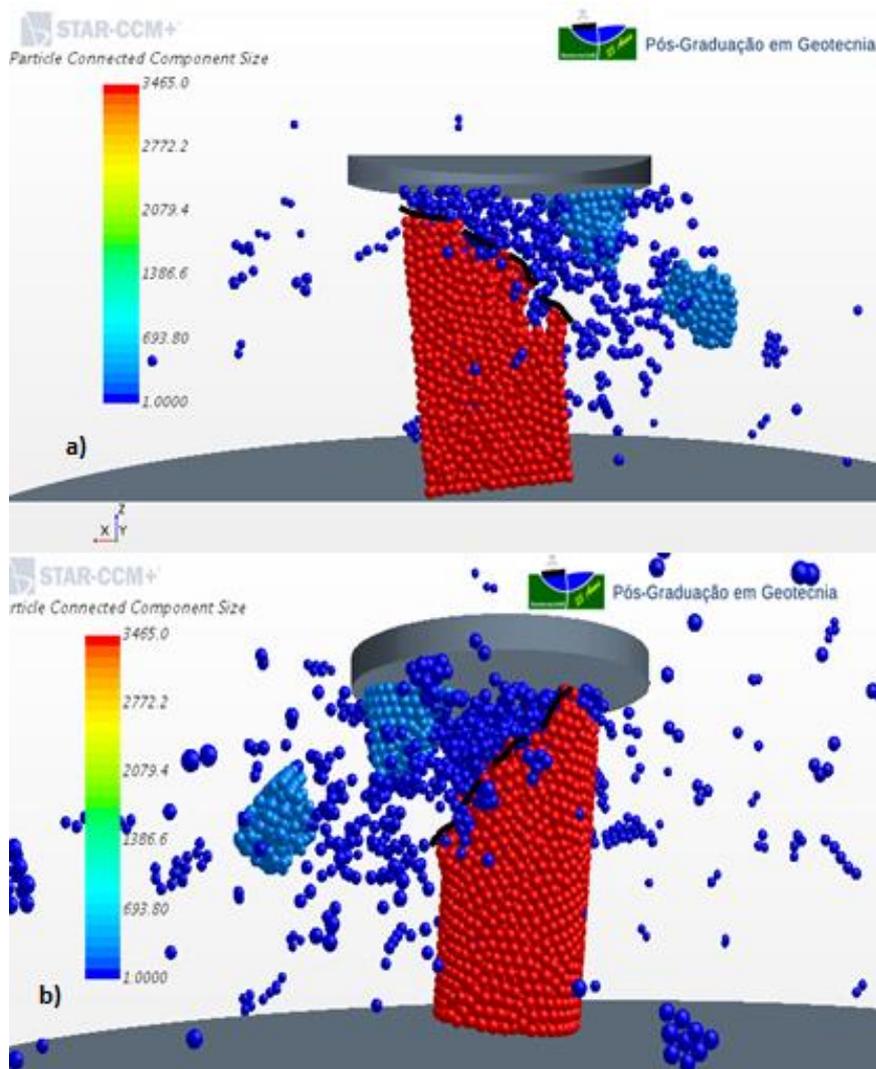


Figura 5.1 – Modelo DEM com HM/BPM: (a) Seção transversal no meio da amostra, ressaltando o rompimento da mesma; (b) Representação do rompimento da amostra em 3D.

Uma primeira análise dos resultados dessa bateria de ensaios é feita com base na curva força *versus* tempo, representada pela Figura 5.2 (a). No apêndice A, são mostrados os resultados das curvas e formas de ruptura para diferentes valores do multiplicador do raio de ligação paralela ($\bar{\lambda}$), e diferentes módulos de elasticidade das partículas (E_c). A Figura 5.2 (b) é uma representação da deformação da amostra em um plano de medição escolhido, com

ajuda destes planos é possível obter as deformações das amostras e, em seguida, o coeficiente de Poisson. Na Figura 5.2 (c) é mostrado o gráfico da quantidade de ligações intactas, para amostra gerada com os parâmetros da Tabela 5.2 apresentada acima. Deste gráfico destaca-se que a diminuição de ligações intactas por quebra das mesmas, anteriores ao pico de resistência não é tão forte como após o pico. Já na Figura 5.2 (d) é ilustrada a distribuição da resistência do cimento assim como seu desvio padrão.

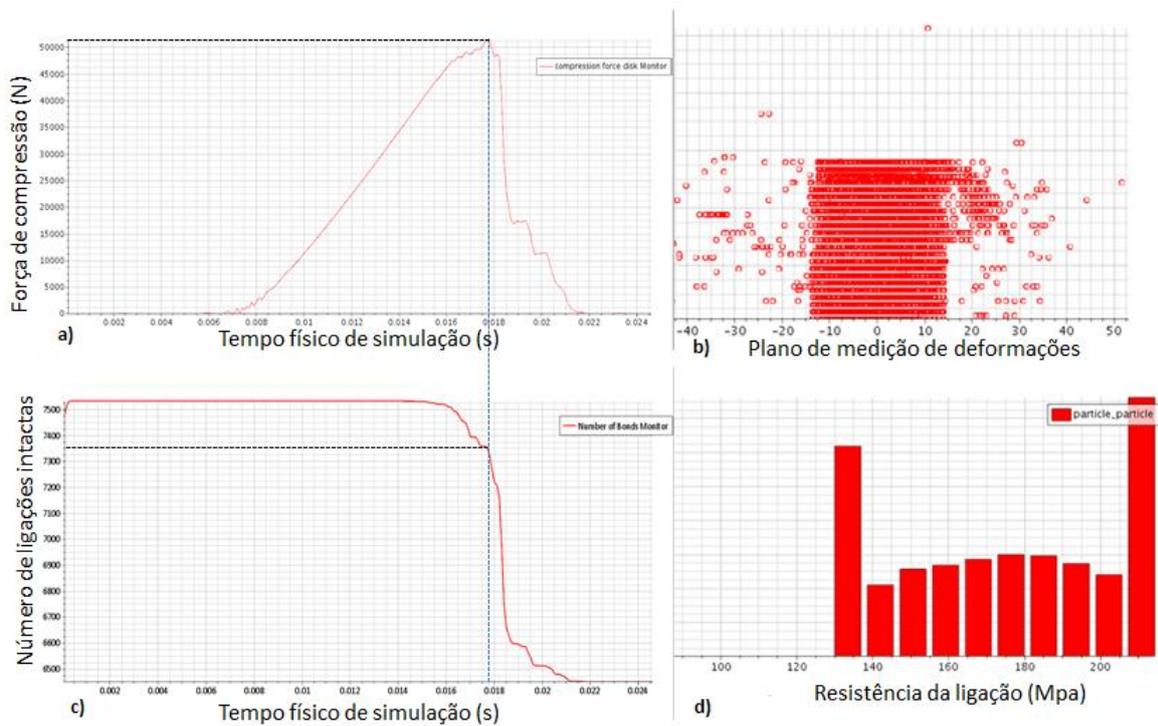


Figura 5.2 – a) Gráfico de força *versus* tempo físico de simulação; b) Plano de medição de deformações c) Número de ligações intactas ; b) Distribuição da resistência das ligações.

O comportamento do ensaio virtual corresponde com a física do ensaio real, quanto ao plano de ruptura, como apresentado na Figura 5.1. Entretanto, com estas leis de contato e seus respectivos parâmetros não se obtiveram a resistência e a deformação observadas em laboratório para o granito *Lac du Bonnet*. O valor da resistência a compressão simples calculada foi de 73.5 MPa, enquanto o valor experimental, descrito na Tabela 5.1, deveria ser da ordem de 200 ± 22 MPa. Numa tentativa de reproduzir estes valores de resistências nos ensaios virtual, foi trocado o valor do raio da ligação paralela ($\bar{\lambda}$) para os de valores de 1,2 e 1,5, já que o $\bar{\lambda}$ afeta a seção cimentante entre partículas.

O resultado de aumentar o multiplicador do raio da ligação ($\bar{\lambda}$) é mostrado na Figura 5.3. Pode-se observar que a força de pico da rocha virtual aumenta com a área da seção

cimentante, passando de cerca de 52 kN para $\bar{\lambda} = 1.0$ na Figura 5.2(a) para valores de 72 kN para $\bar{\lambda} = 1.2$ cerca de 109 kN para $\bar{\lambda} = 1.5$ na Figura 5.3 (a) e (b), respectivamente. Estes valores correspondem a valores de resistência a compressão simples de 73,5, 101,8 e 154,2 MPa, para os valores de $\bar{\lambda}$ iguais a 1,0, 1,2 e 1,5, respectivamente.

Por outro lado, percebe-se que o aumento do raio cimentante também afeta a rigidez e a deformação na ruptura da amostra virtual de rocha. As figuras são geradas automaticamente pelo software e não estão na mesma escala. Para facilitar foram incluídas linhas tracejadas, indicando uma reta no trecho linear até o pico e setas indicando o instante da deformação inicial do trecho linear, o instante de pico e o instante final em que a força volta a zero. Os valores dos módulos calculados foram de 23,4, 33,5 e 46,2 MPa, para os valores de $\bar{\lambda}$ iguais a 1,0, 1,2 e 1,5, respectivamente. Não foi possível reproduzir a resistência e a deformabilidade observada nos resultados experimentais, para o conjunto de parâmetros microscópicos adotados.

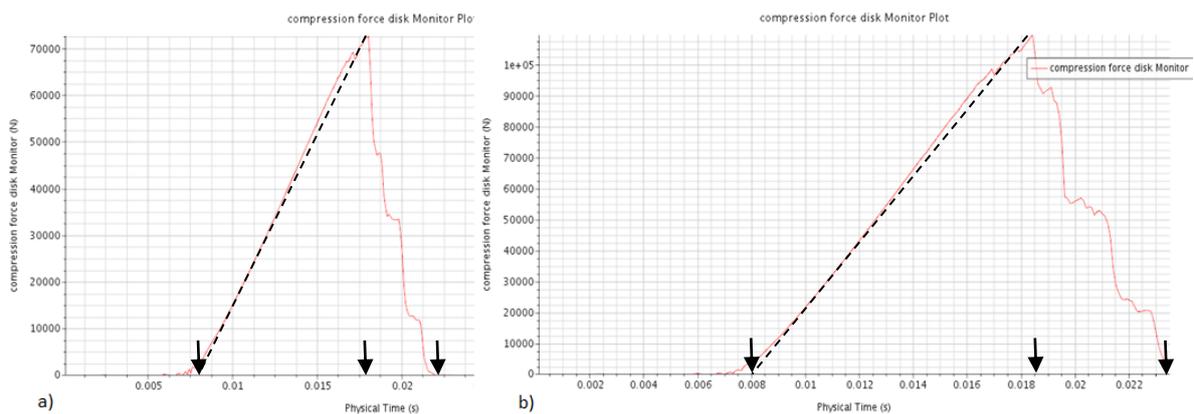


Figura 5.3 – a) Curva de força máxima com $\bar{\lambda} = 1.2$; b) Curva de força máxima com $\bar{\lambda} = 1.5$.

Em função dos resultados anteriores decidiu-se trocar a lei de contato, optando-se por utilizar o modelo de contato linear junto com o BPM. Os valores dos parâmetros utilizados são apresentados na seguinte Tabela 5.3.

Tabela 5.3– Parâmetros microscópicos utilizados com modelo linear/BPM.

Micropropriedades das partículas			
Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Diâmetro mínimo da partícula	D_{min}	1.91	mm
Relação dos diâmetros das partículas	D_{max}/D_{min}	1.252	-
Densidade	ρ	2630	Kg/m ³
Módulo de Young das partículas	E_c	70	Gpa
Coefficiente de Poisson	ν	0.256	-
Coefficiente de atrito da partícula	μ	0.5	-
Relação entre a rigidez normal e cisalhante no contato em BPM	(\bar{k}^n / \bar{k}^s)	2.5	-
Relação entre a rigidez normal e cisalhante na partícula	(k_n / k_s)	2.5	-
Coefficiente normal de restituição	$C_{n\ rest}$	0.3	-
Coefficiente tangencial de restituição	$C_{t\ rest}$	0.3	-
Micropropriedades da ligação			
Multiplicador do raio da ligação paralela	$\bar{\lambda}$	1	-
Resistência normal da ligação paralela , média	$\bar{\sigma}_{c,mean}$	175	Mpa
Resistência normal da ligação paralela , desvio	$\bar{\sigma}_{c,std}$	40	Mpa
Resistência cisalhante da ligação paralela cisalhante, média	$\bar{\tau}_{c,mean}$	175	Mpa
Resistência cisalhante da ligação paralela , desvio	$\bar{\tau}_{c,std}$	40	Mpa
Velocidade da compressão	v_{comp}	0.2	m/s
Implicit time step	-	1×10^{-4}	seg
Time scale do DEM solver	-	0.2	-

As razões entre a rigidez normal e cisalhante dos grãos e do cimento foram as mesmas para reduzir o número de parâmetros livres. O valor da razão, $k_n/k_s = 2.5$ foi escolhido após algumas tentativas de modo a reproduzir o coeficiente de Poisson macroscópico observado para a rocha nos ensaios experimentais. Em seguida, o módulo dos grãos ($E_c = 70$ GPa) foi escolhido após algumas tentativas para reproduzir o módulo de Young macroscópico.

Os valores médios de resistência normal e cisalhante do cimento também foram definidos iguais entre si ($\bar{\sigma}_{c,mean} = \bar{\tau}_{c,mean} = 175$ MPa) e controlam o valor global da

resistência à compressão não confinada da amostra. Os desvios padrões das resistências normal e cisalhante também foram assumidos iguais e o valor adotado de 40 MPa foi definido de modo a corresponder à tensão de iniciação da fissura (σ_{ci} ; ver discussão abaixo). O coeficiente de atrito das partículas parece afetar apenas a resposta pós-pico e não está claro para qual valor deve ser calibrado. Assim, $\mu = 0,5$ é usado como um valor supostamente razoável.

Com esses parâmetros em nível microscópico são obtidos os resultados para a simulação numérica dos ensaios de compressão simples. Um resultado representativo após a ruptura é ilustrado na Figura 5.4 e o aspecto geral da superfície de ruptura é fisicamente compatível com o que se espera experimentalmente. Acredita-se que a "explosão" de algumas partículas deva-se à rápida liberação de energia devido ao passo de tempo e amortecimento adotados para viabilizar as análises numéricas.

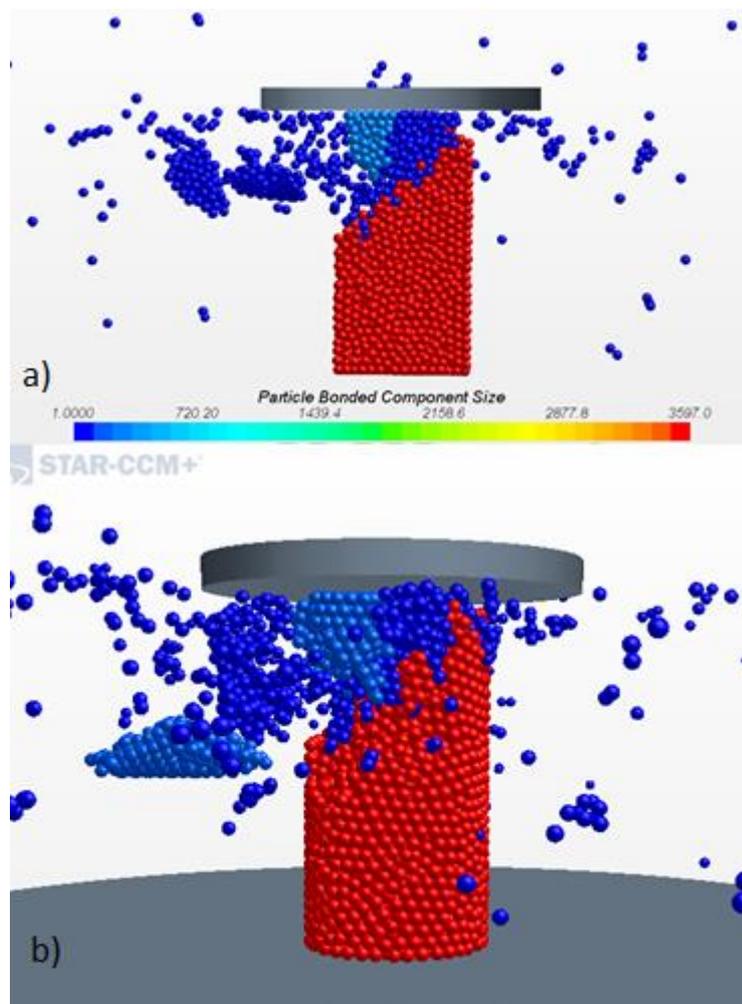


Figura 5.4 – Modelo DEM com contato linear/BPM: (a) Seção transversal no meio da amostra, ressaltando o rompimento da mesma; (b) Representação do rompimento da amostra em 3D.

Uma segunda análise dos resultados dessa bateria de ensaios se faz por meio das curvas σ versus ε , como ilustrado na Figura 5.5. Deste ensaio são determinados o módulo de Young e o coeficiente de Poisson macroscópicos do meio.

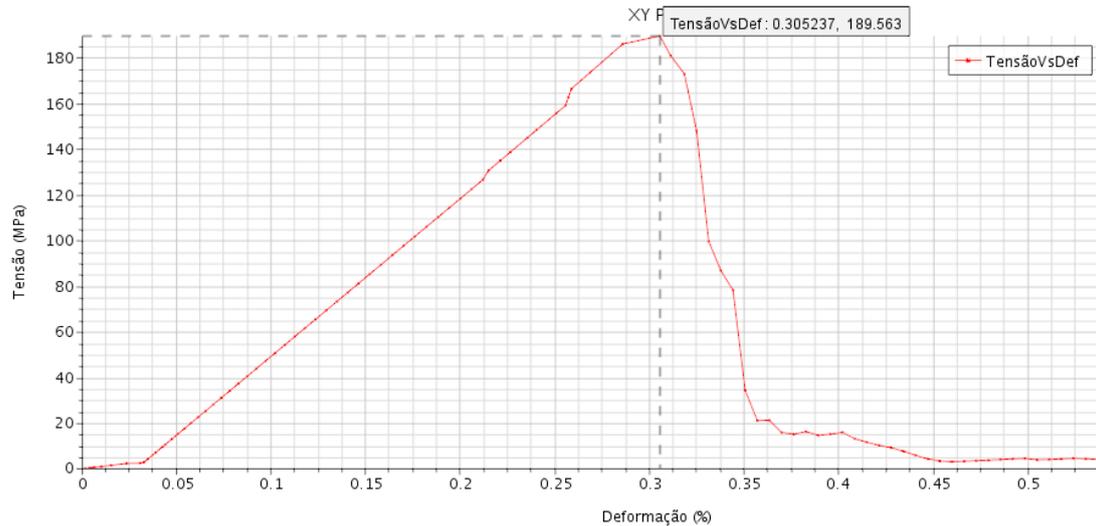


Figura 5.5 – a) Curva de Tensão vs Deformação

As constantes elásticas macroscópicas são calculadas utilizando os incrementos de tensão e deformação ocorridos entre o início do ensaio e o ponto em que foi obtida metade da tensão de pico. Para o material 3D, o módulo de Young é calculado por:

$$E = \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta\varepsilon_A} \quad 5.1$$

O coeficiente de Poisson é calculado a partir da deformação lateral e da deformação axial como:

$$\nu = -\frac{\Delta\varepsilon_L}{\Delta\varepsilon_A} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Delta\varepsilon_V}{\Delta\varepsilon_A} \right) \quad 5.2$$

em que ε_L é a deformação lateral e $\Delta\varepsilon_V = \Delta\varepsilon_x + \Delta\varepsilon_y + \Delta\varepsilon_z$ é a deformação volumétrica.

5.2 SIMULAÇÃO DO ENSAIO BRASILEIRO

De forma semelhante aos ensaios de compressão simples, executou-se os ensaios de tração indireta, também conhecido como ensaio de tração por compressão diametral e ensaio

brasileiro. O modelo geométrico consta de um cilindro de diâmetro 60 mm e altura 30 mm (Figura 5.6) e a geração da amostra é semelhante à do ensaio de compressão simples.

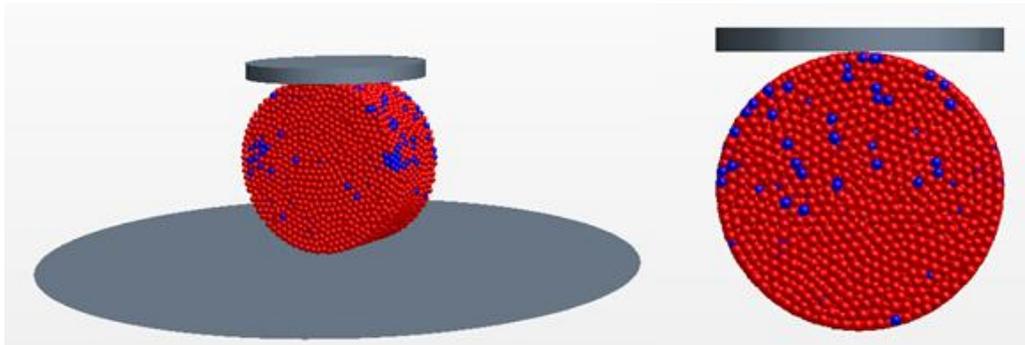


Figura 5.6 – Ensaio brasileiro. (a) Perspectiva 3D do modelo DEM; b) vista frontal.

As micro-propriedades utilizadas são as mesmas apresentadas na Tabela 5.3. O teste foi executado movendo a parede rígida superior a uma velocidade constante (0,00002 m/s) até atingir a ruptura. O aspecto geral após a ruptura é ilustrado na Figura 5.7. Observa-se que as fissuras causadas durante o ensaio são distribuídas ao longo do plano diametral de aplicação da carga, como determina a análise teórica deste problema. A amostra DEM foi dividida por trincas induzidas por tração, como mostrado na Figura 5.7(c), e em boa concordância com o padrão de observado no laboratório e mostrado na Figura 5.7 (d).

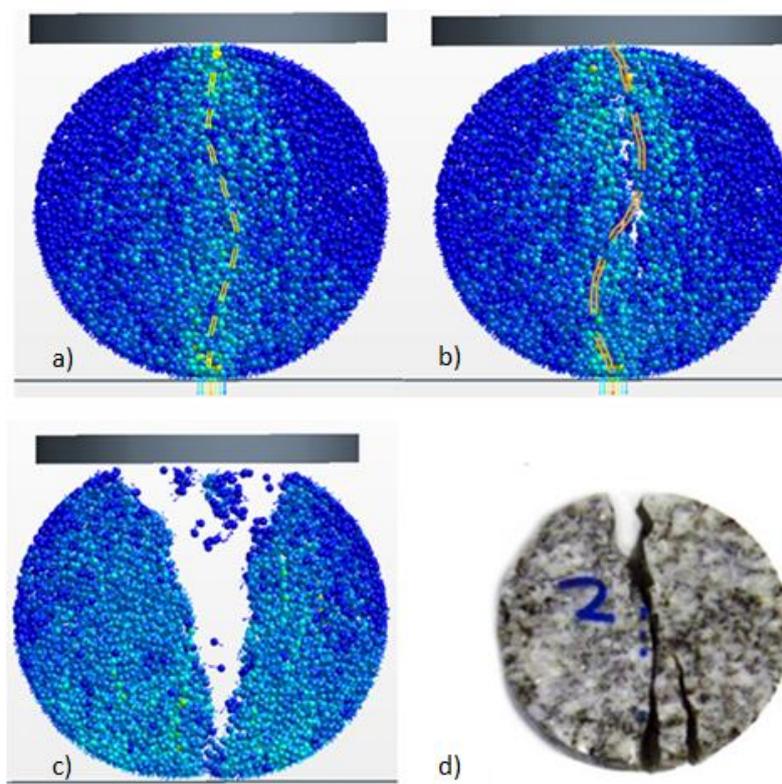


Figura 5.7 – Ensaio brasileiro: (a) Iniciação das trincas de tração 3D; (b) Início da ruptura; (c) Padrão de ruptura observado na simulação via DEM; (d) Padrão de ruptura observado no teste de laboratório.

A curva força-tempo obtida na simulação do teste brasileiro é mostrada na Figura 5.8. Observa-se que a força aumenta quase linearmente até um valor de pico. Esta curva permite determinar a resistência à tração do material modelado com o método de elementos discretos.

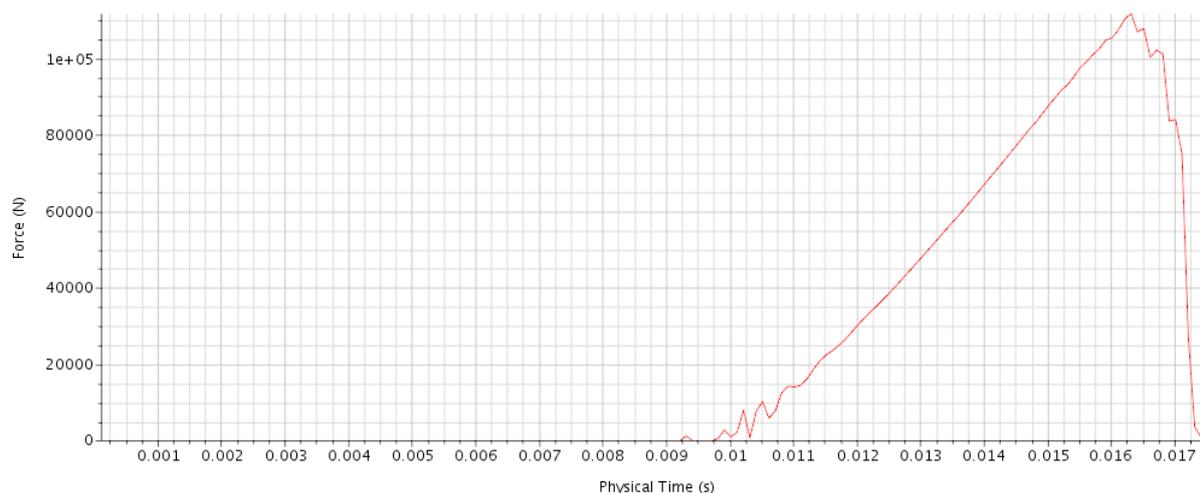


Figura 5.8 – Curva força versus tiempo no ensaio brasileiro

A resistência à tração é calculada mediante a seguinte fórmula:

$$\sigma_t = \frac{2F_f}{\pi D L} \quad 5.3$$

onde F_f é a força de pico que atua sobre a placa diametral, e D e L são o diâmetro e a altura, respectivamente, do corpo de prova.

De posse dos valores de resistência à tração e de resistência a compressão (do item anterior) é possível determinar os parâmetros macroscópicos de coesão e ângulo de atrito do material, com base no critério de ruptura de Mohr-Coulomb. O critério de Mohr-Coulomb é um modelo linear empírico que tem sido adotado para diferentes rochas e solos. Este critério pode ser expresso em termos de tensões principais como:

$$\sigma_1 = 2c \sqrt{k_p} + k_p \sigma_3 \quad 5.4$$

onde

$$k_p = \frac{1 + \sin \phi}{1 - \sin \phi} \quad 5.5$$

Com as tensões de ruptura obtidas através do ensaio de compressão simples onde $\sigma_1 = q_u$ e $\sigma_3 = 0$ e para o ensaio brasileiro para o qual $\sigma_1 = 3\sigma_t$ e $\sigma_3 = -\sigma_t$, tal como ilustrado na Figura 5.9, é possível determinar os parâmetros de coesão (c) e ângulo de atrito (ϕ) do material, da seguinte forma:

$$k_p = \frac{q_u - 3\sigma_t}{\sigma_t} \quad 5.6$$

onde obtém-se o valor da coesão como;

$$c = \frac{q_u}{2\sqrt{k_p}} \quad 5.7$$

e do ângulo de atrito:

$$\phi = \sin^{-1} \left(\frac{k_p - 1}{k_p + 1} \right) \quad 5.8$$

A Figura 5.9 mostra a envoltória de resistência obtida considerando o critério de ruptura de Mohr-Coulomb. Estes valores serão apresentados na Tabela 5.4.

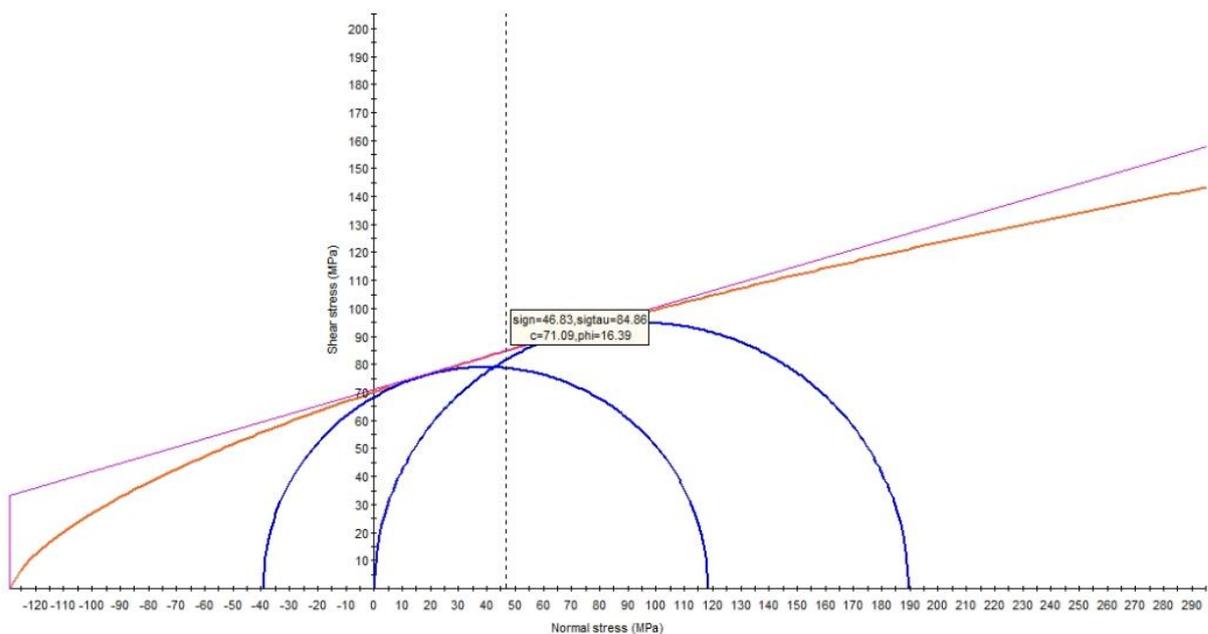


Figura 5.9 – Envoltória de resistencia de Mohr-Coulomb.

5.3 APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS QUANTITATIVOS

Nesta seção discute-se quantitativamente os resultados das análises numéricas tanto do ensaio de compressão simples quanto de tração indireta, comparando-se com os valores obtidos experimentalmente e numericamente por outros autores. A Tabela 5.4 repete os dados experimentais de Martin (1993) e resultados numéricos obtidos por Potyondy (2004) com o programa PFC e acrescenta na última coluna os dados obtidos neste trabalho com o programa STAR CCM+.

Em cada coluna da Tabela 5.4 os valores dos parâmetros macroscópicos são mostrados em termos de média mais ou menos o desvio padrão. Foram usadas $m=81$ amostras em alguns resultados experimentais, $m=10$ amostras nas simulações numéricas com o PFC e $m=6$ amostras nas simulações numéricas com o STAR CMM+. Ressalta-se que a aleatoriedade dos resultados numéricos advém do próprio modelo BPM que adota um input em forma de distribuição normal (média e desvio padrão) para os parâmetros microscópicos da cimentação nas direções normal e tangencial com mostrado na Tabela 5.3. Entretanto, o pacote de partículas usado em cada simulação é sempre o mesmo, mudando apenas a distribuição espacial de resistência da cimentação.

Tabela 5.4 – Macropropriedades dos modelos e do Lac du Bonnet granite

Propriedade	Lac du Bonnet granite	PFC2D model, Dmed=0.72 mm	PFC3D model, Dmed=1.53 mm	STAR CCM+ 3D model, Dmed=2.12 mm
E (GPa)	$69 \pm 5.8 (m = 81)$	$70.9 \pm 0.9 (m = 10)$	$69.2 \pm 0.8 (m = 10)$	$69.07 \pm 1.38 (m = 6)$
ν	$0.26 \pm 0.04 (m = 81)$	$0.237 \pm 0.011 (m = 10)$	$0.256 \pm 0.014 (m = 10)$	$0.255 \pm 0.0145 (m = 6)$
q_u (MPa)	$200 \pm 22 (m = 81)$	$199.1 \pm 13 (m = 10)$	$198.8 \pm 7.2 (m = 10)$	$189.42 \pm 3.6 (m = 6)$
σ_{ci} (MPa)	$90 + \sigma_3, \sigma_3 < 30$	$71.8 \pm 21.8 (m = 10)$	$86.6 \pm 11 (m = 10)$	$93.08 \pm 3.92 (m = 6)$
σ_{cd} (MPa)	$150, \sigma_3 = 0$	NA	$190.3 \pm 7.5 (m = 10)$	$130.28 \pm 5.87 (m = 6)$
σ_t (MPa)	$9.3 \pm 1.3 (m = 39)$	$44.7 \pm 3.3 (m = 10)$	$27.8 \pm 3.8 (m = 10)$	$38.49 \pm 8.87 (m = 6)$
ϕ (deg)	59	$29.5 \pm 4.8 (m = 10)$	$32.1 \pm 2.4 (m = 10)$	$17.78 \pm 12.2 (m = 6)$
c (MPa)	30	$58.5 \pm 8.5 (m = 10)$	$55.1 \pm 4.2 (m = 10)$	$70.64 \pm 20.35 (m = 6)$

Comparando os resultados numéricos com os experimentais, percebe-se a excelente concordância para os parâmetros obtidos do ensaio de compressão simples, principalmente para o módulo de Young (E), o coeficiente de Poisson (ν) e a resistência à compressão simples (q_u). Isto não é uma surpresa justamente porque os valores dos parâmetros microscópicos de módulo de Young (Ec) e razão de rigidez (k_n/k_s) dos grãos e de resistência da cimentação, apresentados na Tabela 5.3, foram calibrados justamente para tentar reproduzir os parâmetros macroscópicos observados no granito de *Lac du Bonnet*. A

comparação dos demais parâmetros (σ_{ci} e σ_{cd}), obtidos do ensaio de compressão simples requer um pouco mais de detalhamento teórico.

A relação tensão-deformação de uma rocha sujeita a testes de compressão pode ser classificada em cinco regiões, de acordo com vários estudos (TAPPONNIER, 1976; GOODMAN, 1989; LAJTAI et al., 1991; MARTIN AND CHANDLER, 1994; GATELIER et al., 2002; TAHERI et al., 2016). Estas regiões são apresentadas na Figura 5.10 e descritas a seguir:

- I. Região de fechamento das fissuras. O estágio inicial da curva tensão-deformação exibe deformabilidade não linear devido ao fechamento de micro fissuras pré-existentes na amostra, e depende da densidade inicial da fissura e da sua geometria.
- II. Região de deformação elástica. Uma vez que as fissuras pré-existentes estão fechadas, as deformações axial, lateral e volumétrica aumentam linearmente com a tensão axial. Assim, a deformação elástica da amostra de rocha intacta domina esta parte das curvas tensão-deformação.
- III. Início do fissuramento e região de crescimento de fissuras estáveis. Esta região é caracterizada pelo início de novas fissuras e pela propagação controlada das fissuras pré-existentes. Alguns autores (BRACE et al., 1966) relataram que esta região começa para um nível de tensão igual a 30-50% do pico de tensão, e referiram-se a essa tensão, como tensão de início da fissura σ_{ci} . Além disso, no ponto final desta região pode-se identificar a transição da deformação volumétrica de compressão para dilatação.
- IV. Fissura de dano e região de crescimento instável. Esta região foi primeiramente definida por Bieniawski (1967) para identificar onde a estrutura do espécime da rocha muda, devido à dilatância volumétrica que é gerada. A densidade de fissuras aumenta rapidamente e pode atingir cerca de sete vezes o valor das fissuras pré-existentes (HALLBAUER, 1972). Este aumento imediato resulta na ocorrência da inversão da deformação volumétrica em consequência de a deformação lateral crescer tão rapidamente que excede a deformação axial. Tal mudança ocorre frequentemente em um nível de tensão axial da ordem de 70-85% da tensão de pico, e é referida como a tensão de dano σ_{cd} .

- V. Região pós-pico. O início desta região é marcado pelo pico de tensão σ_f que é usado para estabelecer a envoltória da curva de resistência à ruptura. Nesta fase, inicia-se a superfície de fratura macro e ocorre ruptura da amostra.

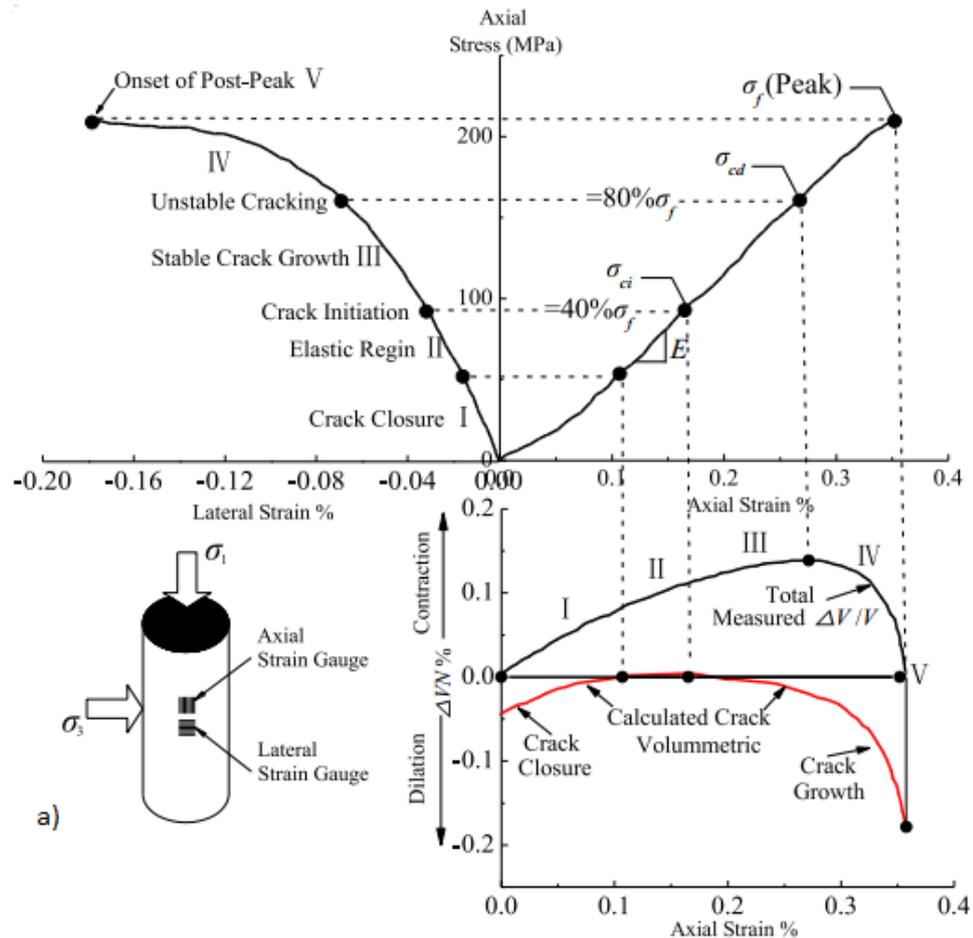


Figura 5.10 –Relação tensão - deformação obtida experimentalmente a partir do ensaio de compressão simples no granito *Lac du Bonnet* (Martin & Chandler, 1994).

Os três níveis de tensão característicos, ou seja, a tensão de iniciação da fissura σ_{ci} , a tensão de dano σ_{cd} e o pico de tensão σ_f , são muito importantes na relação tensão-deformação, mas é muito difícil detectá-los em laboratório, exceto pelo pico de resistência. O resultado experimental de Martin & Chandler (1994) para uma das amostras ensaiadas, representativa da média, e mostrado na Figura 5.10. Na curva com abscissa para a direita e ordenada para cima tem-se a tradicional relação entre a tensão axial e a deformação axial. Nesta porção identifica-se claramente uma resistência de pico em torno de 210 MPa e a deformação axial na ruptura no pico em torno de 0,36%. No geral a curva é praticamente linear com uma leve curva (para cima) no início e uma curvatura (para baixo) antes do pico.

Esta última não linearidade fica mais perceptível quando se plota a tensão axial versus a deformação lateral (curva com a abscissa para a esquerda). Porém é na curva de deformação volumétrica versus deformação axial que se distingue mais claramente as cinco regiões descritas anteriormente. A zona I de fechamento de trincas pré-existentes ocorreu até cerca de 50 MPa; a zona II de linearidade elástica até cerca de 90 MPa, quando se inicia a formação de trincas por cisalhamento das ligações; a zona III de crescimento estável das trincas vai até cerca de 165 MPa; e a zona IV de dano instável até o pico, é marcada claramente pela dilatação na curva de variação volumétrica.

Na Figura 5.11 mostra-se o resultado da simulação numérica, fazendo um contraponto com a Figura 5.10. Acrescentou-se ainda uma nova curva em vermelho, com ordenada à direita, que mostra a evolução do número de ligações quebradas versus o avanço das deformações axiais. O módulo de Young global, o pico de resistência e o início das fissuras mostram uma boa concordância com os resultados experimentais, dentro da faixa variação dos resultados numéricos e reais. Pode-se observar que a ruptura macroscópica da rocha real é causada pela iniciação e propagação de micro-fissuras que podem ser correlacionadas com a ruptura progressiva das ligações à medida que se aumentam as forças externas. Quando um contato rompe, as partículas que o formavam ficam livres e deslizam umas em relação às outras, dependendo apenas da força gerada pelo atrito entre elas. Desta forma, a facilidade de deslizamento destas partículas sem ligação no contato faz com que a deformação dos contatos próximos seja maior, podendo romper progressivamente, até gerar uma zona de ruptura generalizada e um mecanismo de separação da amostra em partes distintas, uma que permanece praticamente como um corpo rígido e outra que desliza e se fragmenta progressivamente até a falha final.

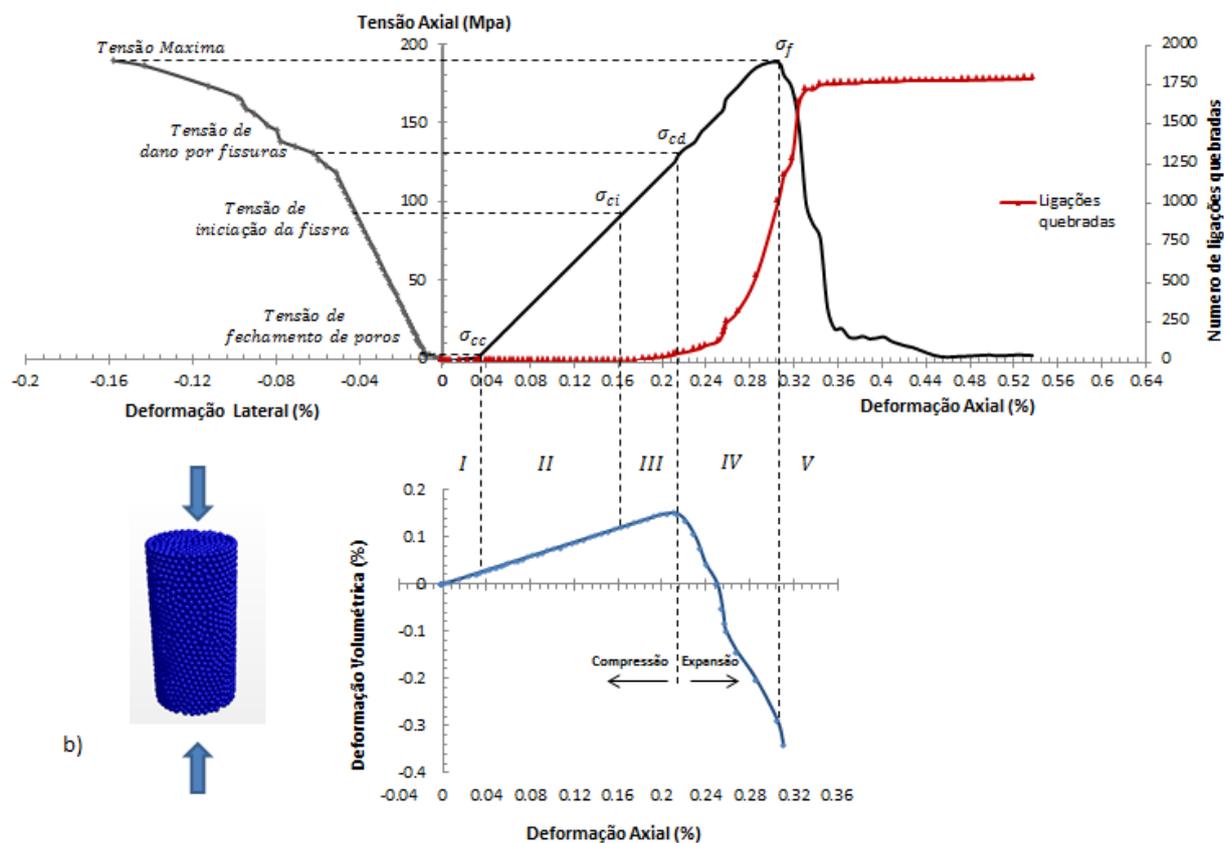


Figura 5.11 –Diagramas tensão-deformação obtidos numericamente do ensaio de compressão simples DEM, mostrando também o número de ligações quebradas.

O processo de ruptura progressiva da amostra simulada via DEM também pode ser classificado em cinco fases distintas, como foi descrito por Shen (2015):

Fase I: Praticamente nenhuma carga axial é absorvida enquanto o pistão desce inicialmente. Esta fase inicial no modelo numérico corresponde à acomodação da placa superior até mobilizar um número razoável de partículas para aplicar uma carga que possa ser considerada uniforme. Também podem ocorrer pequenas acomodações de partículas no interior do corpo de prova não se percebe a curva côncava típica do fechamento inicial de trincas em amostras reais, uma vez que não foram incluídas trincas (ou ligações rompidas) pré-existentes na amostra numérica.

Fase II: Não são gerados danos na amostra, uma vez que o número de ligações quebradas permanece nulo nesta fase. Nesta fase, a capacidade de deformação elástica das cimentações desempenha um papel dominante, porque as relações entre a tensão e as deformações lateral, volumétrica e axial são todas lineares. A zona de linearidade elástica foi observada até cerca de 90 MPa, como no ensaio real.

Fase III: O início das quebras das ligações cimentícias indica o começo da terceira região e a tensão correspondente é referida como tensão de iniciação da fissura, σ_{ci} , nas simulações via DEM. Como resultado da geração de fissuras, a relação tensão versus deformação lateral começa a apresentar não linearidade. Além disso, a deformação volumétrica atinge o seu valor máximo no final desta fase, devido à taxa crescente de deformação lateral que excede a deformação axial.

Fase IV: O nível de tensão axial no momento da reversão da deformação volumétrica marca o início desta fase, e é chamado de tensão de dano por fissuras, σ_{cd} . Este ponto está em torno de 130 MPa no modelo numérico. Além disso, pode ser observado pela inclinação da curva do número de ligações quebradas-deformação axial, que as fissuras se propagam rapidamente, o que está em boa concordância com a principal característica da região de fissura instável em rochas reais. Nota-se claramente reprodução da dilatação também na simulação numérica.

Fase V: É definida pelo o início do comportamento pós-pico. Após o pico, as respostas de deformação lateral e de deformação volumétrica exibem uma dilatação contínua, até se atingir uma resistência residual determinada por atrito. A quebra de ligação cessa. Não foi identificado um estado crítico com estabilização das deformações, pois a amostra rompe fisicamente com um comportamento frágil.

Quanto ao ensaio de tração indireta por compressão diametral, o valor médio calculado de resistência ($\sigma_t=38.5$ MPa) é 4.1 vezes superior ao valor médio experimental (9,3 MPa). Isto ocorre porque os parâmetros microscópicos foram calibrados tendo como principal preocupação reproduzir os valores macroscópicos do ensaio de compressão simples. Para simplificar o número de combinações durante a calibração, assumiu-se a mesma razão de rigidez normal e cisalhante para os grãos e para o contato, bem como a mesma resistência normal e cisalhante para a cimentação.

A relação entre a resistência à compressão e a resistência à tração do granito *de Lac du Bonnet* (ver Tabela 5.1) era da ordem de 21,5 vezes (200/9.3), enquanto que a razão calculada foi de apenas 4,9 vezes (189/38.5). Este valor se deve principalmente ao fator de se ter utilizado o mesmo valor (175 MPa) de resistência microscópica em tração e em cisalhamento para a cimentação. Desta forma estima-se que a resistência à tração da cimentação deveria ser reduzida tentativamente por um valor da ordem de 5 vezes para algo em torno de 35 MPa.

Os valores de resistência à tração obtidos com o programa STAR-CCM+ são compatíveis com os valores numéricos determinados por Potyondy (2004), que também não logrou bons resultados pelo mesmo motivo. As diferenças entre as análises numéricas devem-se à adoção de diferentes diâmetros médios para os grãos. É conhecida na literatura a limitação do modelo BPM para reproduzir valores compatíveis de resistência a compressão e a tração, quando estes diferem da ordem de 20 vezes. Isto se deve ao fato de que as ligações não transmitem momentos após a quebra (WU, 2015). Para sanar este problema, outros modelos foram propostos recentemente, tal como FJM (*Flat Joint Model*) ou a utilização de clusters de partículas com diferentes valores de resistência de cimentação.

O elevado valor numérico da resistência à tração tem implicações diretas no cálculo dos parâmetros globais de resistência ao cisalhamento, coesão e ângulo de atrito, calculados de acordo com as equações 5.7 e 5.8, com base apenas em ensaios de tração e de compressão. Altos valores de resistência à tração levam a círculos de Mohr com maiores diâmetros, uma vez que a tensão desvio é quatro vezes o valor de σ_t no ensaio de tração indireta. Isto implica em maiores valores de coesão e menores valores de ângulo de atrito quando conjugado com os valores do ensaio de compressão simples. Com base apenas nos dados experimentais de $q_u=200$ MPa e $\sigma_t=9.3$ MPa, pode-se estimar uma coesão $c=23$ MPa e um ângulo de atrito de $\phi=64^\circ$. Estes valores são compatíveis com os valores obtidos de ensaios triaxiais e mostrados na Tabela 5.4, mas o atrito observado parece um tanto elevado.

5.4 ANÁLISE PARAMÉTRICA DA RIGIDEZ E TAMANHO DOS GRÃOS

Os resultados macroscópicos da simulação numérica dependem diretamente dos parâmetros físicos e geométricos dos grãos que constituem as partículas. Em especial o módulo de Young dos grãos (E_c) são usados diretamente para calcular os parâmetros de rigidez dos contatos (ver equações 3.39 e 3.41). O tamanho dos grãos também tem uma grande influência nos valores globais de resistência e rigidez da amostra, uma vez que o raio da partícula afeta diretamente a área da seção transversal da cimentação, através do parâmetro multiplicador do raio da ligação paralela ($\bar{\lambda}$), como mostrado na equação (3.30). Desta forma nesta seção mostra-se uma análise paramétrica do efeito de E_c e do tamanho médio dos grãos nas principais propriedades macroscópicas analisadas.

Nas figuras 5.12 e 5.13, mostra-se como o efeito de uma micro-propriedade (neste caso, o módulo de Young das partículas) atua sobre uma macro-propriedade (neste caso, o

valor máximo da resistência a compressão simples (q_u) do material, e sua deformação no ponto de ruptura).

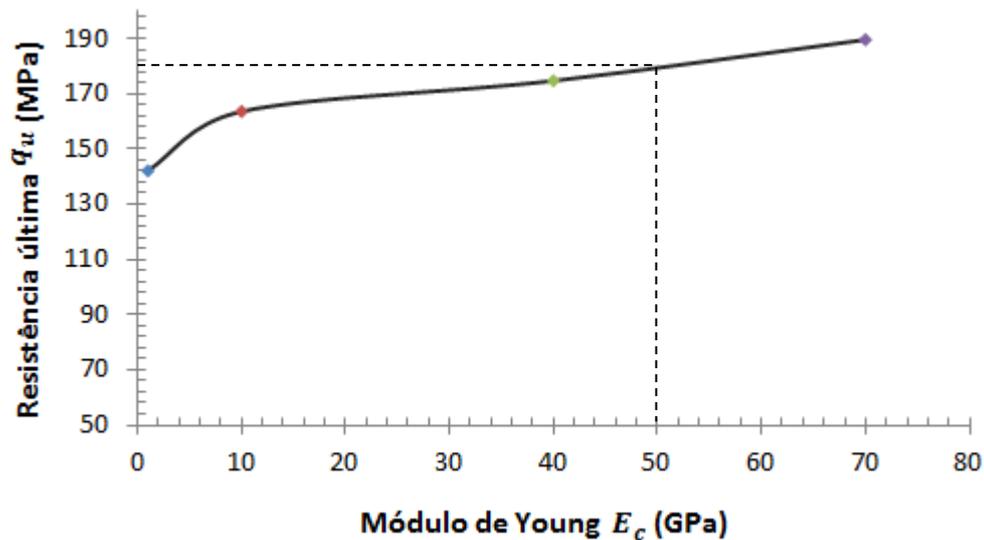


Figura 5.12 – Curva de resistência a compressão simples *versus* Módulo de Young das partículas.

Observa-se que a resistência última (q_u) aumenta com o aumento do módulo de Young das partículas. Para reproduzir o valor experimental ($q_u=200\pm 22$ MPa), o módulo da partícula da rocha analisada deve estar na faixa de 50 GPa (ver Figura 5.12) até cerca de 100 GPa (estimado). O valor adotado de $E_c=70$ GPa é bem ajustado.

Já na Figura 5.13 Percebe-se que deformação axial necessária para atingir a resistência de pico diminui rapidamente à medida que a rigidez das partículas aumenta. Isto se explica pelo modelo de contato adotado, uma vez que as rigidezes normal e cisalhante da amostra aumentam diretamente com os módulos elásticos equivalentes das partículas em contato. Neste caso logrou-se um bom ajuste em forma de potência, mostrado na figura, com um alto coeficiente de determinação ($R^2=0.98$).

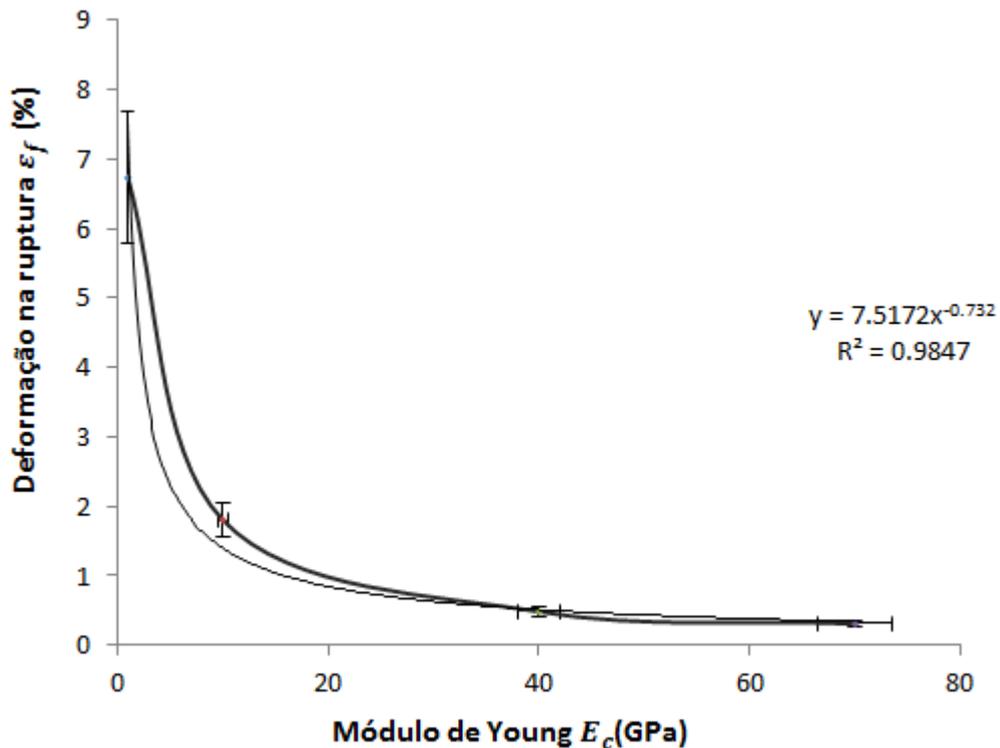


Figura 5.13 – Curva de deformação máxima *versus* Módulo de Young das partículas.

Se o modelo DEM/BPM for usado para prever a formação de fissuras em materiais granulares submetidos a efeitos de forças externas, modelos numéricos com maior resolução, consecutivamente mais finos, podem ser gerados diminuindo o tamanho das partículas D_{min} e mantendo todas as outras micro-propriedades fixadas.

Como já foi mencionado na seção 4.2.5, o efeito da discretização sobre o valor da resistência à compressão simples não é significativo para relações diâmetro da amostra por diâmetro da partícula suficientemente grandes ($D_a/D_p > 20$ ou $L/R > 80$). Porém, a utilização de grande quantidade de partículas acarreta altos custos computacionais, e normalmente são utilizados empacotamentos que tendem a ter uma relação que geralmente é inferior a 20. Com base em dados gerados por Potyondy (2004) usando o programa PFC3D e o mesmo modelo de BPM para a cimentação, faz-se uma análise da influência do tamanho da partícula nas macropropriedades. Na Tabela 5.5 são apresentados os valores médios de algumas propriedades macroscópicas com seus respectivos coeficientes de variação. Ressalta-se que para cada relação de tamanho (D_a/D_p) foram geradas 10 amostras com diferentes distribuições espaciais do valor de resistência da cimentação.

Tabela 5.5 – Influência do tamanho da partícula nas macro-propriedades. Dados de Potyondy (2004).

D_a/D_p	D_{med} (mm)	E (GPa)		ν		q_u (MPa)		σ_t (MPa)		c (MPa)		ϕ (deg)	
		Valor	Variação	Valor	Variação	Valor	Variação	Valor	Variação	Valor	Variação	Valor	Variação
21	1.53	69.2	1.2%	0.256	5.5%	198.8	3.6%	27.1	13.7%	55.1	7.6%	32.1	7.4%
16	2.04	67.6	1.8%	0.255	5.8%	186.9	1.5%	33	22.5%	51.6	6.9%	32.3	9.2%
10	3.05	64	3.9%	0.254	8.1%	169.6	3.4%	35.4	26.1%	48.4	7.6%	30.6	9.8%
5	5.95	57.3	10%	0.231	21.2%	127.9	12%	43.6	27.8%	40	11.4%	25.9	14.2%

Na Figura 5.14 mostra-se como a resistência à tração varia com o diâmetro das partículas, para uma amostra de tamanho constante (altura $L=63.4$ mm, $L/D=2$). Percebe-se uma redução da resistência à tração da amostra à medida que se aumenta relação de diâmetros (D_a/D_p). O aumento da resistência macroscópica para maiores valores de D_p deve estar relacionado com o aumento da área cimentada entre os grãos, a qual é obtida a partir dos raios dos grãos em contato inicial.

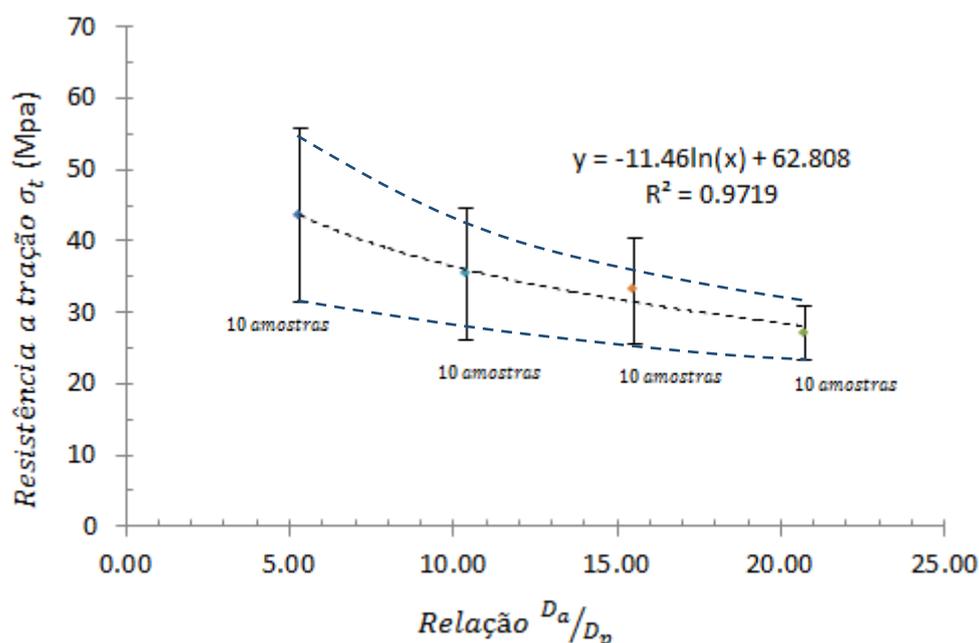


Figura 5.14 Variação da resistência à tração σ_t com a relação de diâmetro D_a/D_p .

Na Figura 5.15 mostra-se a variação da resistência à compressão simples com o aumento da relação de diâmetros (D_a/D_p). Percebe-se uma tendência de aumento da resistência à compressão com o aumento da relação D_a/D_p , ou seja, redução do tamanho dos grãos. Neste caso logrou-se um bom ajuste em forma logarítmica, mostrado na figura, com um alto coeficiente de determinação ($R^2=0.98$).

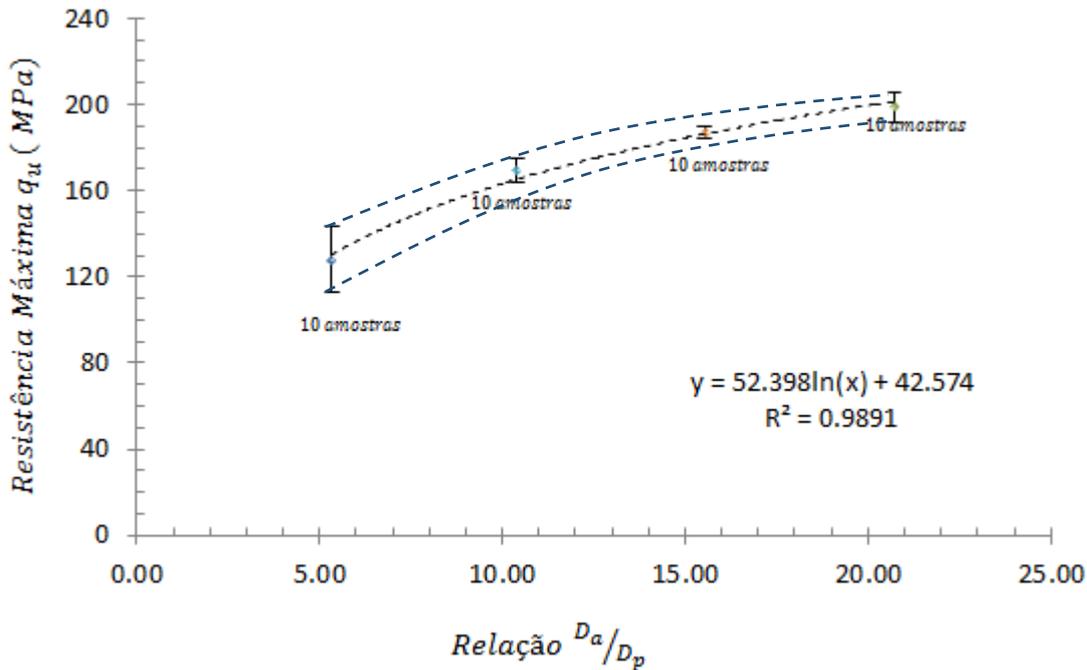


Figura 5.15 Variação da resistência à compressão simples q_u com a relação de diâmetros (D_a/D_p).

É curioso e aparentemente contraditório que a diminuição da relação D_a/D_p (pelo aumento do diâmetro da partícula D_p) tenha o efeito numérico de aumentar a resistência à tração indireta e ao mesmo tempo diminuir a resistência à compressão simples. Deve-se buscar uma explicação com base nos fatores de segurança global contra a ruptura nos respectivos planos de tração e de cisalhamento nos ensaios correspondentes. O fator de segurança pode ser definido como a relação entre a tensão resistente e tensão atuante no plano de ruptura, ou seja:

$$FS^t = \frac{\sigma_{resistente}^t}{\sigma_{atuante}^t} \quad 5.9$$

No caso do plano de ruptura vertical do ensaio de tração indireta.

Para o caso de ensaio de compressão simples a ruptura se dá por cisalhamento em um plano inclinado (de $45^\circ + \phi/2$), no qual o fator de segurança é dado por:

$$FS^s = \frac{\tau_{resistente}^s}{\tau_{atuante}^s} \quad 5.10$$

Nos dois casos a resistência, no numerador das equações (5.9) e (5.10), foi atribuída um valor fixo e igual a 175 MPa (em média). Portanto, o aumento do tamanho do grão deve afetar de maneira inversa os denominadores, diminuindo no caso de tração e aumentando no caso de compressão. De fato é o que indica as equações de tensão máxima de tração atuante e tensão máxima cisalhante atuante, descritas nas equações (3.36) e (3.37) com base na teoria de vigas. Note que o segundo termo, relativo ao momento atuante na cimentação, ao ser somado nas respectivas equações age de modo a diminuir a tensão de tração (que fica menos negativa) e aumentar a tensão cisalhante atuante.

É também fato que as próprias forças e momentos normais e cisalhantes atuantes para manter o equilíbrio com as forças externas também são afetadas pelo raio da área cimentada (a qual é diretamente proporcional ao tamanho dos grãos). Isto se deve à relação de proporcionalidade entre esforços atuantes e as rigidezes normal e cisalhante. O aumento dos grãos leva a um aumento das rigidezes no contato e no cimento, como mostrado nas equações (3.18) e (3.19), sendo até maior no módulo cisalhante. Entretanto, neste caso o efeito do tamanho dos grãos ocorre no mesmo sentido, ou seja, de aumentar todas as rigidezes envolvidas no problema.

Na Figura 5.16 mostra-se a variação do Módulo de Young global da amostra em compressão simples com o aumento da relação de diâmetros (D_a/D_p). Nota-se uma tendência de aumento do módulo (E) com o aumento da relação de diâmetro (D_a/D_p), ou diminuição do tamanho das partículas. O módulo de rigidez normal da amostra é resultado de todas as ligações ativas entre os grãos. À medida que as ligações são quebradas, o dano localizado se reflete na amostra como uma redução na rigidez global e, como explicado anteriormente, o aumento do diâmetro dos grãos tem o efeito de facilitar as quebras de cimentação por cisalhamento.

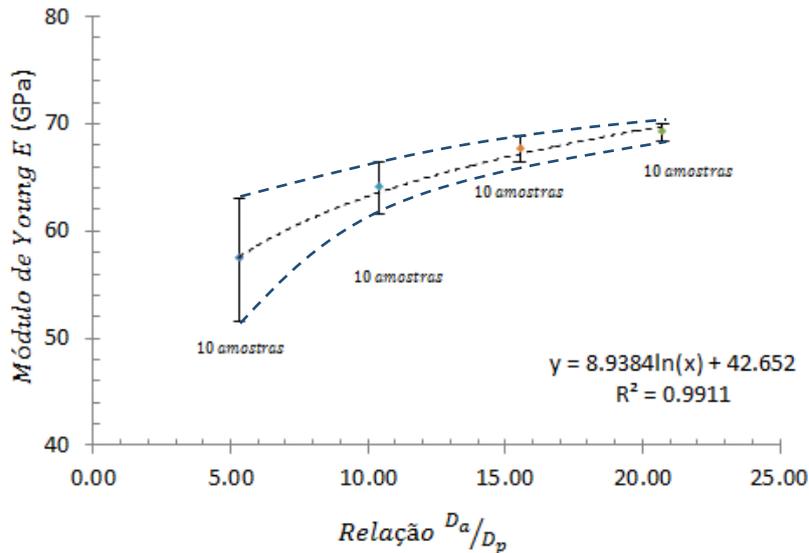


Figura 5.16 – Variação do Módulo de Young E com a relação de diâmetros (D_a/D_p).

Nos gráficos das figuras 5.14 a 5.16 observa-se um aumento da dispersão dos valores dos parâmetros macroscópicos (σ_t , q_u e E) da amostra em torno da média, à medida que se aumenta o tamanho dos grãos, mantendo-se o tamanho global da amostra (diminuição da relação D_a/D_p). Esta dispersão é compatível, porém menor que a dispersão real mostrada na Tabela 5.1 devido a heterogeneidades da amostra. Esta dispersão pode ser tomada como uma indicação indireta para a adoção ou não de um modelo de análise baseado na Mecânica dos Meios Contínuos. Para relações D_a/D_p elevadas todas as curvas de ajuste (logarítmicas) encontradas apontam para um valor assintótico no qual a hipótese de contínuo pode ser adotada. Esta hipótese deve ser evitada quando a relação entre o tamanho da amostra e o tamanho dos grãos for inferior a um certo valor que leve a uma dispersão inaceitável no valor macroscópico da propriedade de interesse para o problema. É interessante perceber que diferentes propriedades são afetadas em maior ou menor grau de intensidade, como se vê na Tabela 5.5. As maiores dispersões foram observadas para o Módulo de Young (E) e para a resistência à tração da amostra (σ_t). Para grãos com $D_{med} = 6$ mm, ou seja, relações $D_a/D_p = 5$, o coeficiente de variação chegou a 10% e 27.8%, respectivamente. Nestes casos, deve-se rejeitar a hipótese de contínuo e adotar uma abordagem mais realista, baseada em meios discretos. Valores de D_a/D_p da ordem de 15 a 20 vezes resultaram em baixa dispersão, com coeficientes de variação menores que 4% para a resistência em compressão e para o módulo de Young da amostra corroborando com outros resultados apresentados na literatura (WU, 2015, e VALLEJOS et al., 2017). Entretanto, a dispersão ainda é relativamente elevada para a resistência à tração e para os parâmetros do critério de Mohr-Coulomb.

6 CONCLUSÕES

Como mostrado nessa dissertação, uma das principais vantagens da abordagem com elementos discretos é que o comportamento constitutivo empírico complexo pode ser substituído por uma lógica mais física e fundamental de contato direto e cimentação entre partículas. Neste contexto, quando a resistência à tração ou ao cisalhamento da zona cimentante é excedida, as ligações entre as partículas rompem. Uma vez que as ligações são quebradas, o campo de deslocamento numa formulação de elemento discreto é controlado pela geometria de partículas e parâmetros do modelo de contato suave (interpenetrações). Este conceito permite simular a inicialização e propagação de danos localizados numa amostra de rocha, reproduzindo adequadamente o fenômeno de ruptura. O processo de dano evolui progressivamente e naturalmente a cada ruptura de contato, o que leva a uma redistribuição das tensões até que haja uma densidade crítica de quebra de ligações que permita que uma superfície de ruptura se propague através de todo o corpo.

Entretanto, os modelos discretos via DEM para materiais granulares apresentam três dificuldades intrínsecas: (1) geração do estado inicial de empacotamento das partículas e distribuição de porosidade; (2) determinação da deformabilidade das próprias partículas; e (3) a necessidade de calibração dos parâmetros para modelos de partículas contra experimentos. O estado inicial do pacote de partículas e a distribuição da porosidade são praticamente desconhecidos em muitos casos de problemas de mecânica da rocha. O efeito da deformação das partículas, até mesmo simulando a quebra das mesmas, pode ser introduzido nas abordagens DEM, mas o custo computacional aumenta consideravelmente, já que o número de partículas para problemas práticos quase sempre é muito grande. O ponto mais crítico é a necessidade de calibração de parâmetros de partículas, tais como distribuição de tamanho, rigidez de contato ou parâmetros de ligação (atrito, coesão, força de ligação, etc.). Uma vez que esses parâmetros não são propriedades geotécnicas convencionais e não podem ser facilmente medidos na escala necessária em laboratório, a maneira usual de superar essa dificuldade é simular o comportamento macroscópico medido das rochas, como as curvas de tensão-deformação obtidas a partir de testes laboratoriais usando amostras de rocha de tamanho padrão. Os parâmetros em nível microscópico são, então, ajustados em aproximações sucessivas até reproduzir as curvas experimentais. Além dos parâmetros físicos também surgem vários parâmetros de controle não físicos, como o amortecimento numérico, de modo a viabilizar o tempo computacional da simulação. A depender dos modelos de

contato e de cimentação adotados podem surgir várias combinações e o processo de calibração pode demandar mais tempo do que uma aplicação em escala real.

Neste trabalho foram usados dados experimentais publicados na literatura internacional para calibrar os parâmetros microscópicos de um baseado no Método dos Elementos Discretos (DEM) conjugado ao modelo de partículas cimentadas (BPM ou *Bonded Particle Model*). Foram utilizados dados de ensaios de compressão simples, ensaios triaxiais e ensaios de tração indireta por compressão diametral realizados por Martin (1993) e Martin e Chandler (1994) no granito *Lac du Bonnet*.

Após várias tentativas de geração do empacotamento inicial, conclui-se que a forma mais adequada para geração dos corpos de prova e condições de contorno dos ensaios pretendidos era acoplar as técnicas de “*overset meshing*” e “*trimmed mesh*”. No primeiro (*overset meshing*) gera-se um cilindro maior que controla a discretização de fato com segundo método (*trimmed mesh*) do contorno cilíndrico que define a amostra do corpo de prova. Em seguida procedeu-se o empactamento das partículas. O número final e o tamanho das partículas tiveram que ser ajustados para 5000 partículas com diâmetro médio de 2.12 mm de modo a viabilizar computacionalmente as análises.

O próximo passo importante foi a definição do modelo de contato entre as partículas. Tentativas iniciais com o modelo de Hertz-Mindlin não lograram uma boa reprodução dos resultados experimentais. Por fim decidiu-se pelo modelo de contato linear acoplado ao modelo de cimentação BPM. A calibração final se deu para um número limitado de parâmetros com base nos ensaios de compressão simples.

O modelo adotado conseguiu reproduzir adequadamente todos os estágios de evolução de dano em amostras de rochas sujeitas a ruptura por compressão simples. Neste aspecto, auxilia muito a visualização da evolução do número de partículas com ligações quebradas ao longo do ensaio. Identifica-se claramente a zona de progressão instável de danos por meio da aceleração das deformações laterais e tendência de dilatação com a evolução das quebras até atingir a resistência de pico. O comportamento pós-pico é típico de uma rocha frágil.

Em seguida procedeu-se a simulação do ensaio brasileiro de tração indireta usando os mesmos parâmetros calibrados do ensaio de compressão simples. Neste caso, consegue-se também uma boa representação qualitativa do mecanismo de inicialização e propagação de fissuras. Entretanto o valor numérico obtido para a resistência à tração da amostra foi cerca de 4 vezes superior em relação ao valor experimental. A incongruência no valor calculado de resistência a tração se refletiu numa sobrestimação no parâmetro de coesão da resistência ao

cisalhamento da rocha e uma subestimação no valor de ângulo de atrito. Estas discrepâncias devem-se ao fator de se ter adotado o mesmo valor para os parâmetros microscópicos de resistência da cimentação sob tração e cisalhamento (175 MPa). Em retrospectiva, percebe-se que o parâmetro de resistência à tração do modelo de cimentação deveria ser minorado por um fator de 5 vezes de modo a manter a mesma relação entre resistência a compressão e tração macroscópica observada nos ensaios experimentais.

Uma análise paramétrica com base em resultados numéricos da literatura permitiu quantificar os efeitos do módulo de Young (E_c) e tamanho médio da partícula (D_p) nas características microscópicas de resistência a compressão simples (q_u), deformação axial na ruptura (ϵ_r), resistência a tração indireta (σ_t), e módulo de Young da amostra (E). Concluiu-se que o aumento da rigidez da partícula (E_c) provoca um aumento linear da resistência a compressão e uma diminuição exponencial da deformação de ruptura. Quanto ao efeito do tamanho do grão, mantendo-se o tamanho global da amostra, conclui-se que um aumento de diâmetro do grão, em relação ao tamanho da amostra, implica em aumento (logarítmico) na resistência global a tração, diminuição da resistência a compressão simples e redução do módulo de Young macroscópico. Foram encontradas relações matemáticas com alto valor de coeficiente de determinação ($R^2 > 0.98$) para os valores médios das variáveis macroscópicas (E , q_u e σ_t) em função de E_c e D_p . Estas relações podem ser úteis para estimar parâmetros quando forem usadas outras discretizações com aumento do tamanho dos grãos (*coarse graining*) por exemplo.

Observa-se que o tamanho da partícula é uma parte essencial da caracterização do modelo, que afeta a rigidez global, a resistência a tração indireta e a resistência à compressão simples. Assim, o tamanho da partícula não pode ser considerado como um parâmetro livre que controla somente a resolução do modelo.

Os resultados numéricos (e experimentais) mostram que a dispersão dos valores de parâmetros macroscópicos em torno da média aumenta na medida em que se reduz a relação (D_a / D_p) entre o diâmetro da amostra e o diâmetro dos grãos adotado na simulação. Para relações $D_a / D_p > 20$ a dispersão é baixa, a depender da propriedade considerada, corroborando com afirmações de outros pesquisadores. Nestes casos é justificável uma abordagem baseada em meios contínuos. Em casos contrários deve-se considerar seriamente a possibilidade de adoção de uma abordagem discreta como a aqui empregada.

Resumindo, pode-se concluir que o modelo de partículas cimentadas apresentado é uma ferramenta de pesquisa para auxiliar na compreensão de processos de ruptura frágeis. Foi

demonstrado que proporcionou uma reprodução adequada do comportamento macroscópico das rochas de forma quantitativa e qualitativa. Além disso, o estudo oferece um procedimento de calibração direto que é extensível ao uso em outras simulações microestruturais baseadas em descontinuidades. Ele também permite estabelecer expressões de regressão para estimar as propriedades macroscópicas do material em função propriedades das partículas.

A modelagem de partículas ligadas ou cimentadas está em uma fase inicial de desenvolvimento. Atualmente se tem um modelo genérico para rocha intacta. Futuros modelos de partículas cimentadas devem ser construídos de acordo com tipos de rocha particulares, como granito, rocha calcária ou arenito.

Apesar de todas as vantagens das simulações apresentadas, pelo menos para os recursos computacionais atualmente disponíveis na maioria das empresas e universidades, o modelo DEM/BPM ainda é uma ferramenta de pesquisa, sendo ideal para o desenvolvimento de um “laboratório de ensaios virtuais” para entender os fenômenos.

6.1 SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

Nesta pesquisa foi apresentada uma metodologia de calibração de parâmetros de materiais rochosos mediante o Método dos Elementos Discretos, a qual precisa ser estudada e aperfeiçoada para obter resultados em menores tempos possíveis. Para que essa metodologia seja concluída, é necessário estudar o efeito de todos os parâmetros microscópicos correspondentes aos dados de entrada necessários a uma simulação com DEM, no comportamento macroscópico do meio.

É preciso incluir nas simulações metodologias modernas de discretização do meio como a apresentada por Morales (2016 a,b) assim como também modelos de grãos complexos e modelos de quebra dos mesmos, assim como novos modelos como os chamados GBM (modelos baseados nos grãos) e os modelos de *Flat-jointed*, com a finalidade de obter todas as respostas realistas possíveis. Também é de vital importância gerar simulações de outros ensaios como são de cisalhamento direto e ensaios triaxiais.

Observa-se, ainda, que parâmetros como ângulo de atrito interparticular, forma das partículas, distribuição granulométrica, velocidade de aplicação do carregamento e resistência da ligação influenciam os parâmetros macroscópicos obtidos. Portanto, para que o DEM possa ser utilizado amplamente nas escalas comercial e de pesquisa, as relações entre essas variáveis e o comportamento macroscópico do empacotamento devem ser entendidas e,

preferencialmente, equacionadas para os modelos mais utilizados, como o linear proposto por Cundall & Strack e o de Hertz-Mindlin.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AUTIO J, WANNE T, POTYONDY D. 2002. Particle mechanical simulation of the effect of schistosity on strength and deformation of hard rock. *In: Hammah R, Bawden W, Curran J, Telesnicki M, editors. NARMS-TAC 2002*. Toronto: University of Toronto Press. pp. 275–82.

ALBUQUERQUE, B.C.P. (2016). Influência do ângulo de atrito da partícula nos parâmetros macroscópicos de resistência do meio no estado plano de deformações, Distrito Federal. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-276/16, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 87p

Baran O. 2012. Discrete element method in STAR CCM+. *STAR Japanese conference*. pp1-12

Bargiel, M., 2008. Geometrical properties of simulated packings of spherocylinders. *In Computational Science - ICCS 2008, volume 5102 of Lecture Notes in Computer Science*, pages 126-135.

BATHE, K & WILSON, E., 1976. Numerical Methods in Finite Element Analysis. Prentice Hall.

BATHE, K. J., 1996. Finite Element Procedures. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

BATHURST, R. & ROTHENBURG, L., 1988. Micromechanical aspects of isotropic granular assemblies with linear contact interactions. *Journal of Applied Mechanics, ASME*, 55(1):17-23, 1988

BELYTSCHKO, T., SMOLINSKI, P. & LIU, W., 1985. Stability of multi-time step partitioned integrators for the first order finite element systems. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 49:281-297.

BOBET, A., 2010. Numerical methods in geomechanics, *The Arabian Journal for Science and Engineering, Volume 35, Number 1B*. 8(1): 27.

Brace, W.F., Paulding, B.W., Scholz, C. 1966. Dilatancy in the fracture of crystalline rocks. *J Geophys Res*, 71(16), pp.53–539

BRADY, B. H. G., 1987. Boundary element and linked methods for underground excavation design. In: Brown, E. T. (ed.), *Analytical and computational methods in engineering rock mechanics*. Allen & Unwin, London, pp. 164–204.

CHANG, C. & MISRA, A., 1989. Theoretical and experimental study of regular packing of granules. *Journal of Engineering Mechanics*, ASCE, 115(4):704-720.

CHANG, C. & MISRA, A., 1990. Packing structure and mechanical properties of granulates. *Journal of Engineering Mechanics*, 116(5):1077-1093.

CLEARY, P., 2000. DEM simulation of industrial particle flows: case studies of dragline excavators, mixing in tumblers and centrifugal mills. *Powder Technology*, Issue 109, pp. 83-104.

CLEARY, P., 2004. Large scale industrial DEM modelling. *Engineering Computations*, Issue 21, pp 169-204

COETZEE, C. J. & ELS, D. N. J., 2008. Calibration of granular material parameters for DEM modelling and numerical verification by blade–granular material interaction. *Journal of Terramechanics*, Issue 46, pp. 15-26.

COOK, B., LEE, M., DIGIOVANNI, A., BRONOWSKI, D., PERKINS, E. & WILLIAMS, J., 2004. Discrete element modeling applied to laboratory simulation of near-wellbore mechanics. *International Journal of Geomechanics, SPECIAL ISSUE: PETROLEUM GEOMECHANICS*, pp. 19-27.

CUI, L. & O'SULLIVAN, C., 2003. Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. *Granular matter*, Issue 5, pp. 135-145.

CUNDALL, P., 1971. A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. *In Symp. Int. Soc. Rock Mech.*, volume 2, pages 132-150.

CUNDALL, P., 1987. Distinct element models of rock and soil structure. In: E. Brown, ed. *Analytical and Computational Methods*. s.l.:Allen and Unwin.

CUNDALL, P.A. & STRACK, O. D. L., 1979. "A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, pp. 29-47.

CUNDALL, P.A. & HART, R.D, 1992. Numerical modeling of discontinua. *Engineering Computations*, 9:101-113.

DIGBY, P., 1981. The effective elastic moduli of porous granular rocks. *Journal of Applied Mechanics*, 48:803-808, 1981

DI RENZO, A.; DI MAIO, F. P.(2004.) Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. *Chemical Engineering Science*, v. 59, p. 525-541.

DONZÉ, F., MORA, P., & MAGNIER, S.-A. 1994. Numerical simulation of faults and shear zones. *Geophysical Journal International*, 116:46-52, 1994.

EVANS J, 1993. Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of Modern Physics*, 65(4):1281-1304.

FENG, Y., HAN, K. & OWEN, D., 2003. Filling domains with disks: An advancing front approach. *International journal for numerical methods in engineering*, 56(5), p. 699–731.

FERREIRA, S. T., 2009. *Estudo e implementação do Método dos Elementos Discretos em 3D*. Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia.

GATELIER, N., PELLET, F., & LORET, B., 2002. Mechanical Damage of an Anisotropic Porous Rock in Cyclic Triaxial Tests, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 39(3), 335–354.

GOODMAN, R. E., 1989, *Introduction to Rock Mechanics*, Wiley, New York.

HALLBAUER D, WAGNER H, COOK N.G.W. 1972. Some observations concerning the microscopic and mechanical behavior of quartzite specimen in stiff, triaxial compression tests. *Int J Rock Mech Min Sci*, 10, pp 713–26

HÄGGSTRÖM, O & MEESTER, R, 1996. Nearest neighbour and hard sphere models in continuum percolation. *Random Structures and Algorithms*, 9:295-315.

HERTZ, H., 1882. Ueber die Berührung elastischer Körper (On Contact Between Elastic Bodies). *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, Issue 92, pp. 156-171.

HENTZ, S., DAUDEVILLE, L. & DONZÉ, F., 2004. Identification and validation of a discrete element model for concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, 130(6):709-719.

HUANG H, 1999. Discrete element modeling of tool-rock interaction. *PhD thesis, University of Minnesota*.

ITASCA, 1998. *PFC2D 2.0 Particle Flow Code in Two Dimensions, Theory and Background*. Minneapolis: s.n.

JIANG, M., KONRAD, J. & LEROUEIL, S., 2003. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies. *Computers and Geotechnics*, Issue 30, pp. 579-597.

JIANG, M., YU, H.S. & HARRIS, D. 2006b. Discrete element modelling of deep penetration in granular soils. *Int. Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Issue 30(2), pp.335-361

JING, L. 2003. A review of techniques advances and outstanding issues in numerical modelling for rock mechanics and rock engineering. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v.40, p. 283-353.

JING, L., STEPHANSSON O, 2007. Fundamentals of Discrete Element Methods for Rock Engineering - Theory and Applications, p. 562.

JOHNSON, K. L., 1985. *Contact Mechanics*. 1st ed. Cambridge: Cambridge University Press.

KUHN, M. R., 2005. "Are granular materials simple? An experimental study of strain gradient effects and localization", *Mechanics of Materials*, 37(5), 607-627.

KRUGGEL-EMDEN, H., STURMA, M., WIRTZA, S., & SCHERERA, V., 2008. Selection of an appropriate time integration scheme for the discrete element method (DEM). *Computers & Chemical Engineering*, 32(10):2263-2279, 2008.

LAGARIAS, J. C., MALLOWS, C. L. & WILKS, A. R., 2002. Beyond the Descartes Circle Theorem. *The American Mathematical Monthly*, Issue 109, pp. 338-361.

LAJTAI, E. Z., CARTER, B. J., & SCOTT DUNCAN, E. J., 1991, Mapping the state of fracture around cavities, *Engineering Geology*, 31, N. 3-4, 277-289.

LIN, X., & NG T.-T., 1997. A three-dimensional discrete element model using arrays of ellipsoids. *Geotechnique*, 47(2):319-329.

LUBACHEVSKY, B & F. STILLINGER, F., 1990. Geometrik properties of random disk packings. *J. Stat. Phys.*, 60:561-583.

MARTIN, C. D., & CHANDLER, N. A., 1994, The Progressive Fracture of Lac du Bonnet Granite, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 31(6), 643-659.

MINDLIN, R. D. & DERESIEWICZ, H., 1953. Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. *Journal of Applied Mechanics*, Issue 20, pp. 327-344.

MORALES, I. P. et al., 2016a. Contributions to the generalization of advancing front particle packing algorithms. *Numerical Methods in Engineering*, Issue 107, pp. 993-1008.

MORALES, I. P., VALERA, R. R., MORFA, C. R. & de FARIAS, M. M., 2016b. Dense packing of general-shaped particles using a minimization technique. *Computational Particle Mechanics*.

NEVES, C.E.V. (2009). Comportamento de Materiais Granulares usando o Método dos Elementos Discretos. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-173/09, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 166 p.

O'ROURKE, P.J. 1981. Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays. Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University.

O'SULLIVAN C., BRAY J.D., 2004. Selecting a suitable time step for discrete simulations that use the central difference time integration scheme. *Engin. Comput.* 21, 278-303.

O' SULLIVAN, C., 2011. *Particulate Discrete Element Modelling*. London and New York: Spon Press.

OÑATE, E. & ROJEK, J., 2004. Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Issue 193.

OÑATE, E., LABRA, C., ZÁRATE, F., J. ROJEK, J. & J. MIQUEL J., 2005 “Avances en el desarrollo de los métodos de elementos discretos y de elementos finitos para el análisis de problemas de fractura”. *Analises de mecánica de la fractura*. Barcelona, España, Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE), Vol 22.

O' SULLIVAN, C., 2014. Advancing Geomechanics using DEM. In: K. K. K. B. G. K. M. Soga, ed. *Geomechanics from Micro to Macro*. s.l.:CRC Press, pp. 21-32.

POTYONDY, D & CUNDALL, P. A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(8):1329{1364, 2004. Rock Mechanics Results from the Underground Research Laboratory, Canada

PÖSCHEL, T. & SCHWAGER, T., 2005. *Computacional Granular Dynamics*. Berlin: Springer.

PREECE, D.S., JENSEN, R.P., PERKINS, E.D. & WILLIAMS, J.R., 1999. Sand Production Modeling Using Superquadric Discrete Elements and Coupling of Fluid Flow and Particle Motion. *Rock Mechanics for Industry, Proc. 37th U.S. Rock Mech. Symp., Amadei, B. et al.*, 161-167

Robertson, D., Bolton, M., 2001. DEM simulations of crushable grains and soils. In: Kishino Y, editor. *Powders and grains*. Lisse. The Netherlands: Balkema. pp. 6–23

ROUGIER, E., MUNJIZA, A., & JOHN, N. W. M., 2004. Numerical comparison of some explicit time integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 61(6):856-879.

SHEN, Z., JIANG, M., WAN, R. 2016. Numerical study of inter-particle bond failure by 3D discrete element method. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 40(4), pp.175–189.

SCHMIDT, D.P., & RUTLAND, C.J. 2000. A New Droplet Collision Algorithm. *Journal Comput Phys*, 164, pp. 62–80.

STOYAN, D., 1998. Random set: Models and statistics. *International Statistical Review*, 66:1-27.

TAHERI, A., YFANTIDIS, N., LAZO OLIVARES, C. S., CONNELLY, B. J. & BASTIAN, T. J., 2016, An experimental study on degradation of mechanical properties of sandstone under different cyclic loadings. *Geotechnical Testing Journal*, 39(4): 673-687

TAPPONNIER P, BRACE W.F. 1976. Development of stress-induced microcracks in westerly granite. *Int J Rock Mech Min Sci*, 13, pp 395–430

TEDESCO, B.M.M.S. (2016). Modelagem numérica de ensaios de enrocamento, Distrito Federal. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-277/16, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 87p.

WALTON, O.R., 1993b. Numerical simulation of inelastic, frictional particle-particle interactions, in *Particulate Two-Phase Flow*. M.C. Roco, Ed., Butterworth–Heinemann, Stoneham, MA, p. 884-911. apud STAR CCM+ User Guide v. 7.04, 2012. Manual.

WU S., XU X., (2015) A study of three intrinsic problems of the classic discrete element method using flat-joint model. *Rock Mech Rock Eng*, 18 pp.

YAO, M., & Anandarajah, A. 2003. Three-Dimensional Discrete Element Method of Analysis of Clays. *J. Engineering Mechanics*, ASCE, 129(6):585-596.

ANEXOS

A – RESULTADOS GRÁFICOS DE SIMULAÇÕES

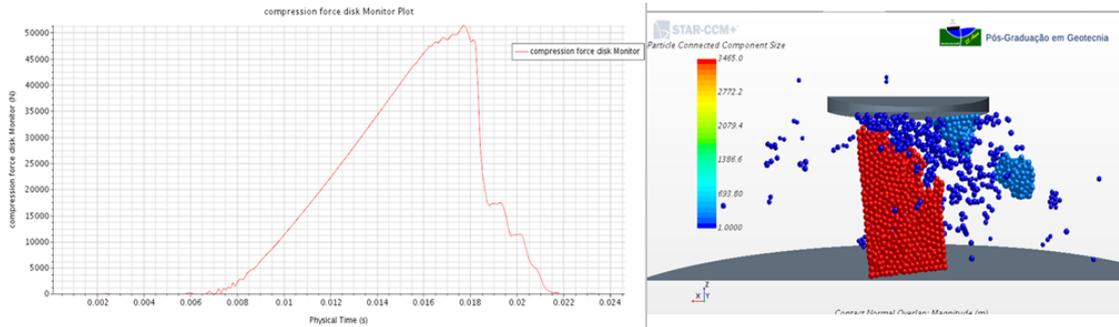


Figura A.1 – Simulação com o multiplicador de raio de ligação ($\bar{\lambda} = 1.0$).

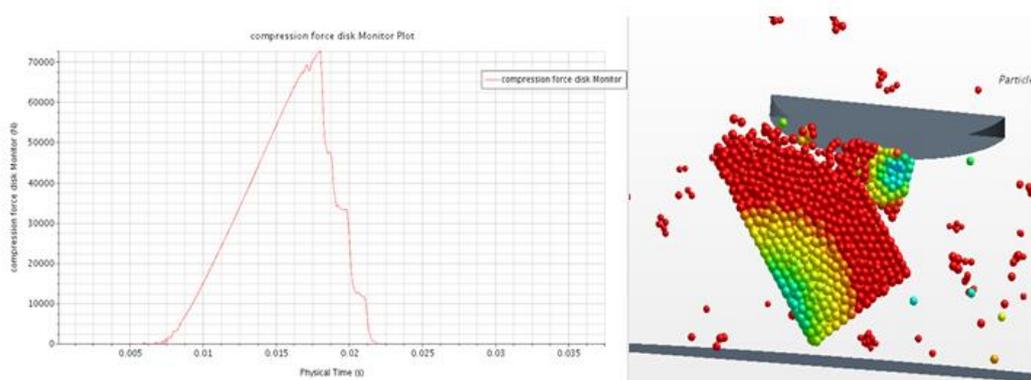


Figura A.2 – Simulação com o multiplicador de raio de ligação $\bar{\lambda} = 1.2$.

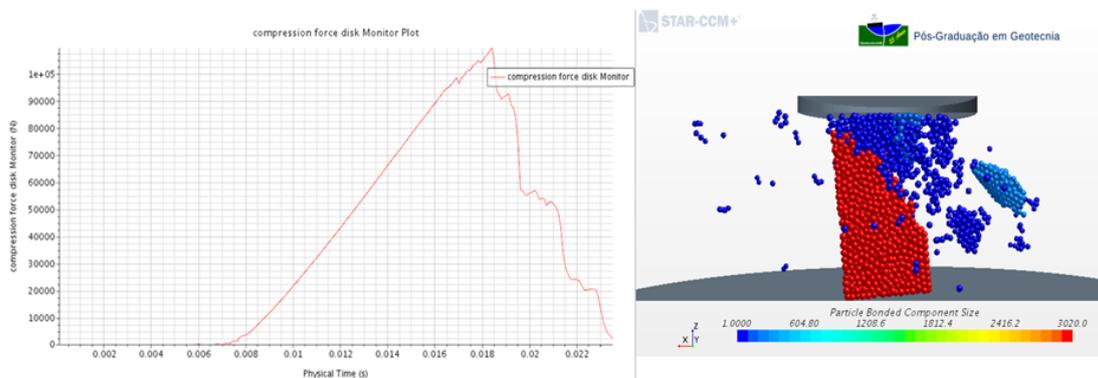


Figura A.3 – Simulação com o multiplicador de raio de ligação $\bar{\lambda} = 1.5$.

As Figuras A.1 - A.3 foram simuladas com os modelos de Hertz-Midlin e o BPM. E nas figuras A.4 - A.9 apresentam-se as simulações com os modelos linear e BPM. Em todos os casos se utilizou 5000 partículas e a mesma distribuição granulométrica. A figura A.11 mostra as curvas de tensão deformação para diferentes valores de módulo de Young das partículas, por último as figuras A.11 e A.12 apresenta-se o o alto custo computacional necessário para este tipo de simulação.

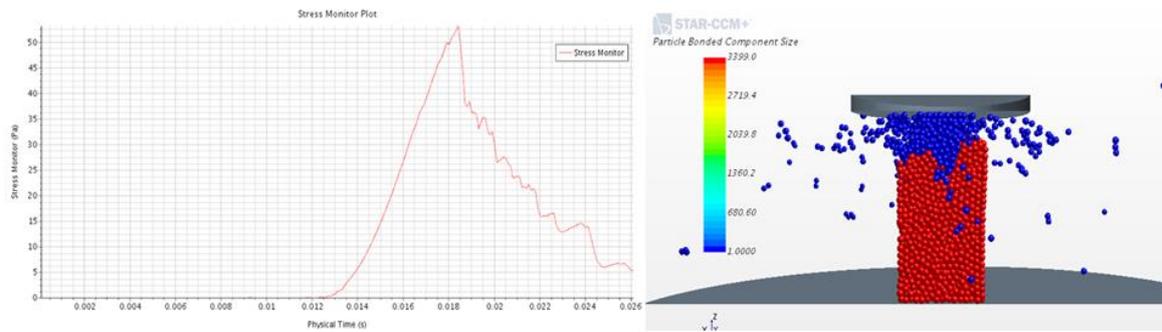


Figura A.4 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 40\text{GPa}$.

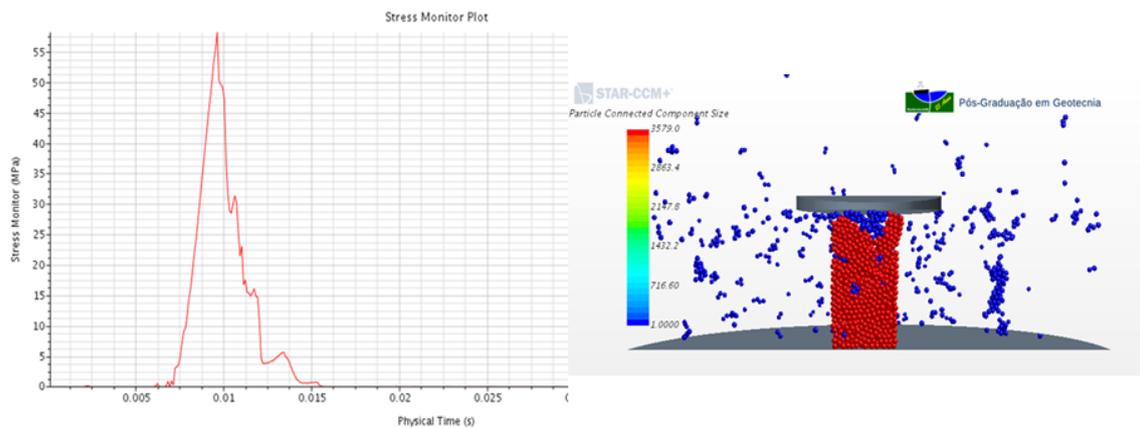


Figura A.5 – Simulação com o modulo de Young das Partículas $E_c = 50\text{GPa}$.

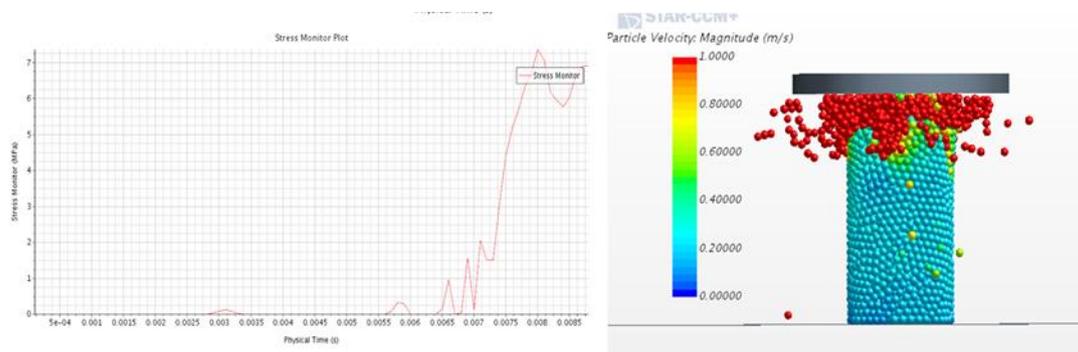


Figura A.6 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70\text{GPa}$.

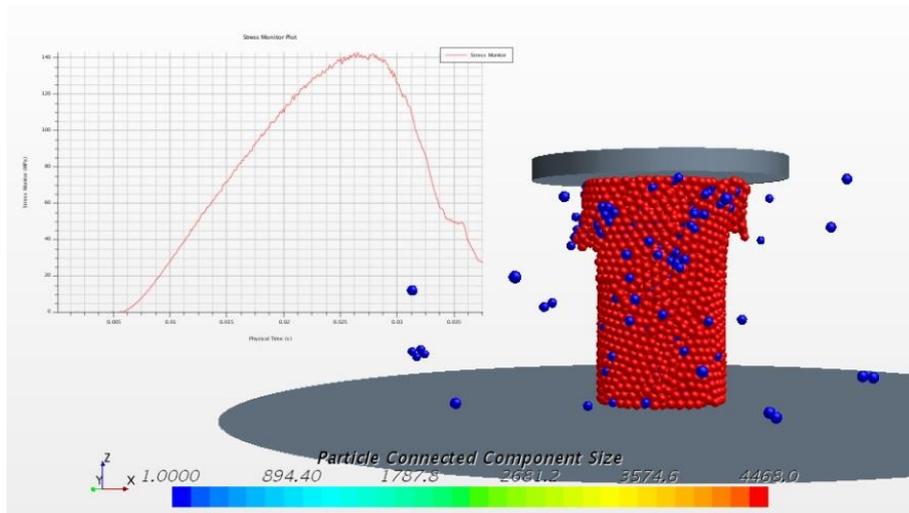


Figura A.7 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 1\text{GPa}$.

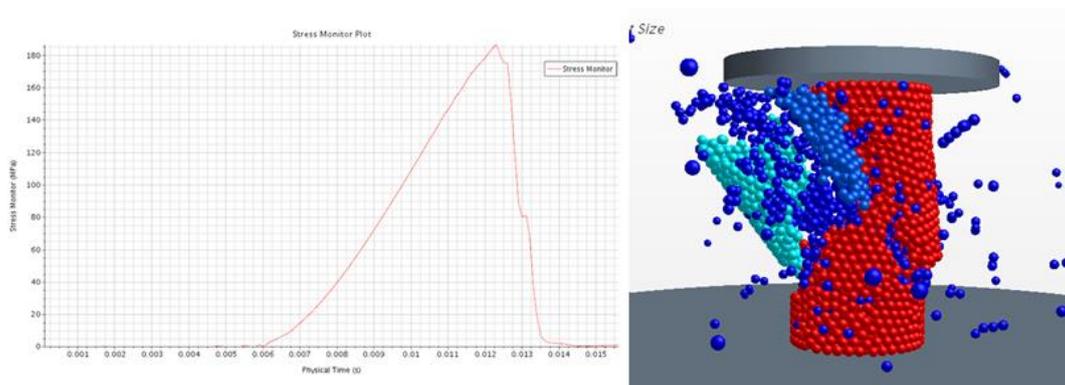


Figura A.8 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 50\text{GPa}$.

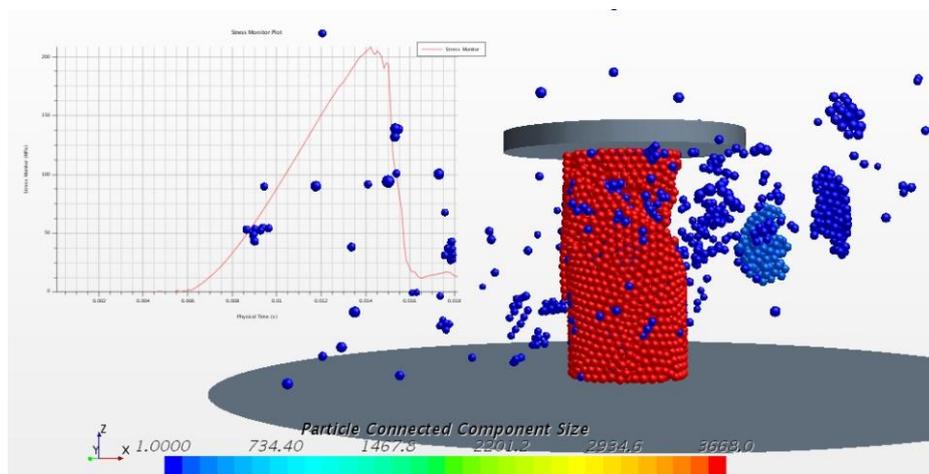


Figura A.9 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70\text{GPa}$.

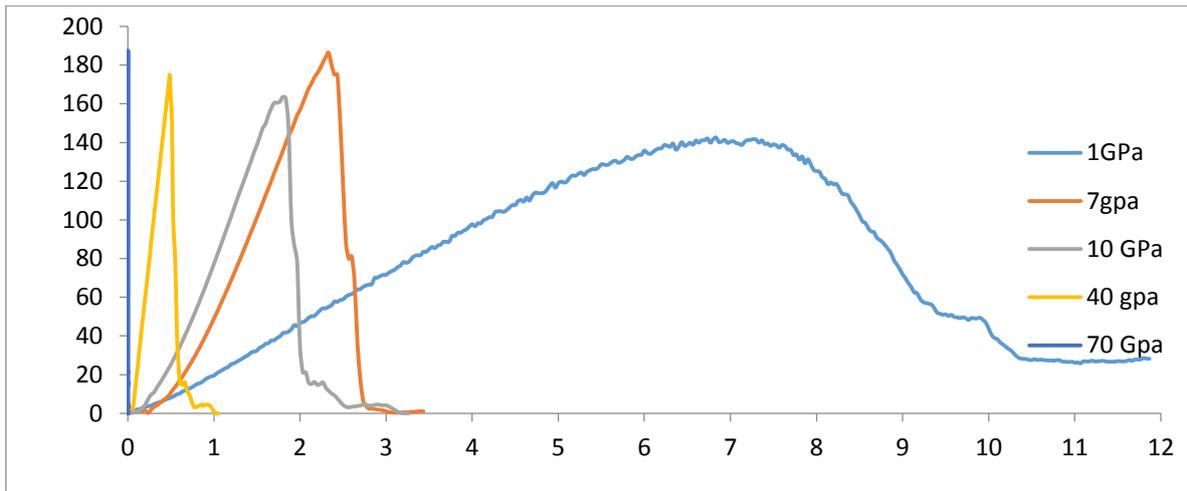


Figura A.10 – Simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 40$ GPa.

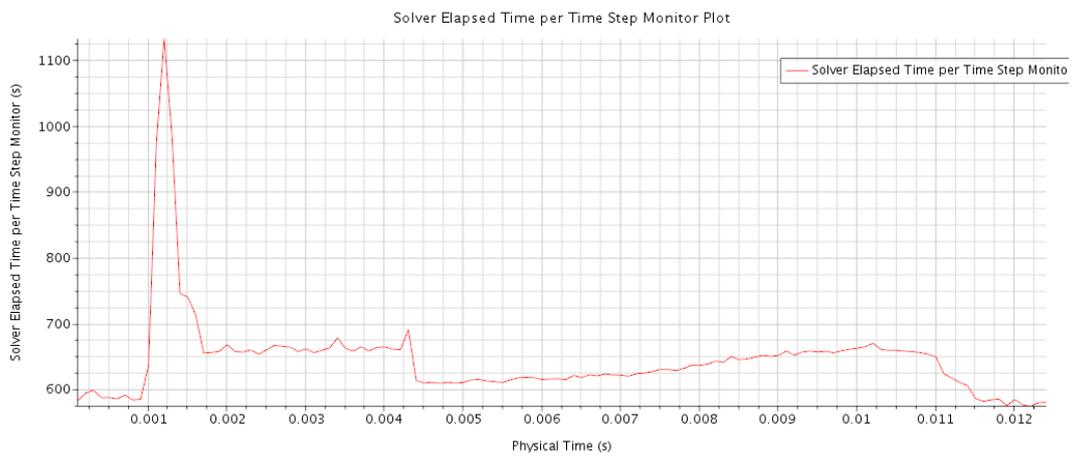


Figura A.11 – Curva de tempo utilizado para realizar a simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 70$ GPa.



Figura A.12 – Curva de tempo utilizado para realizar a simulação com o módulo de Young das Partículas $E_c = 10$ GPa.