

3

Método dos Elementos Discretos (DEM)

O método dos elementos discretos foi inicialmente introduzido por *Cundall* [19]; inspirado na solução de problemas geomecânicos como geotécnicos. Este método tem a capacidade de representar grandes deslocamentos e rotações de corpos interagindo conjuntamente dentro do modelo através dos contactos ou interfaces. A medida que os elementos inicialmente unidos se afastarem, eles podem reconhecer novos contactos criados pela interação com outros corpos, gerando-se forças nessas novas interfaces.

A geração das forças no modelo é feito durante o monitoramento da movimentação de cada elemento, considerando as condições ou propriedades físicas das interfaces para introduzi-las dentro do cálculo conjugando a segunda lei de Newton e a lei de força-deslocamento.

O conceito foi idealizado levando em conta um “time step” ou passo de tempo muito pequeno, para garantir só a propagação da velocidade ou perturbação de forças em uma partícula individualmente, sem que estas sejam transmitidas para partículas vizinhas durante o processo de cálculo.

3.1

Código de Fluxo de Partícula, (PFC)

O código de fluxo de partícula está classificado como um código de elementos discretos, permitindo o deslocamento ou traslação e rotação de corpos discretos. O PFC pode ser considerado como um método simplificação do DEM por estar composto por partículas circulares rígidas a diferença do modelo DEM generalizado que contempla partículas poligonais com capacidades de deformação. Como mencionado anteriormente, a segunda lei de Newton fornece a relação fundamental para o cálculo da movimentação de cada partícula com tendência até o equilíbrio de forças que causaria o modelo deixar de se movimentar.

Dentro da conceptualização do modelo de fluxo de partícula, considera-se as seguintes assunções:

- As partículas são tratadas como corpos rígidos.

- Os contactos entre partículas acontecem em áreas muito pequenas consideradas como pontos de contato.
- A superposição entre partículas é muito pequena em relação ao tamanho da partícula e a magnitude dela esta relacionada as forças de contato usando a lei de força-deslocamento.
- Ligações entre partículas que evitem deslocamentos ou eliminem graus de liberdade dentro de faixas de magnitudes de forças pre-estabelecidas podem ser colocadas para a modelagem de sistemas mais complexos.

3.1.1

Ciclo de cálculo no PFC

Inicialmente em cada ciclo de cálculo no PFC define-se a posição de cada entidade contida no modelo (partículas e paredes), levando em conta os contactos que são gerados ou eliminados durante a simulação. Sendo empregada a a lei de força-deslocamento nos contactos, para atualizar as forças geradas neles pela superposição ou afastamento relativo entre as duas entidades (partícula-partícula ou parede-partícula); conseqüentemente a lei de movimentação (segunda lei de Newton) é aplicada a cada partícula para definir a velocidade dela. Esta velocidade é usada para atualizar a posição da partícula através das forças atuantes em cada contato, conjuntamente com as forças de corpo.

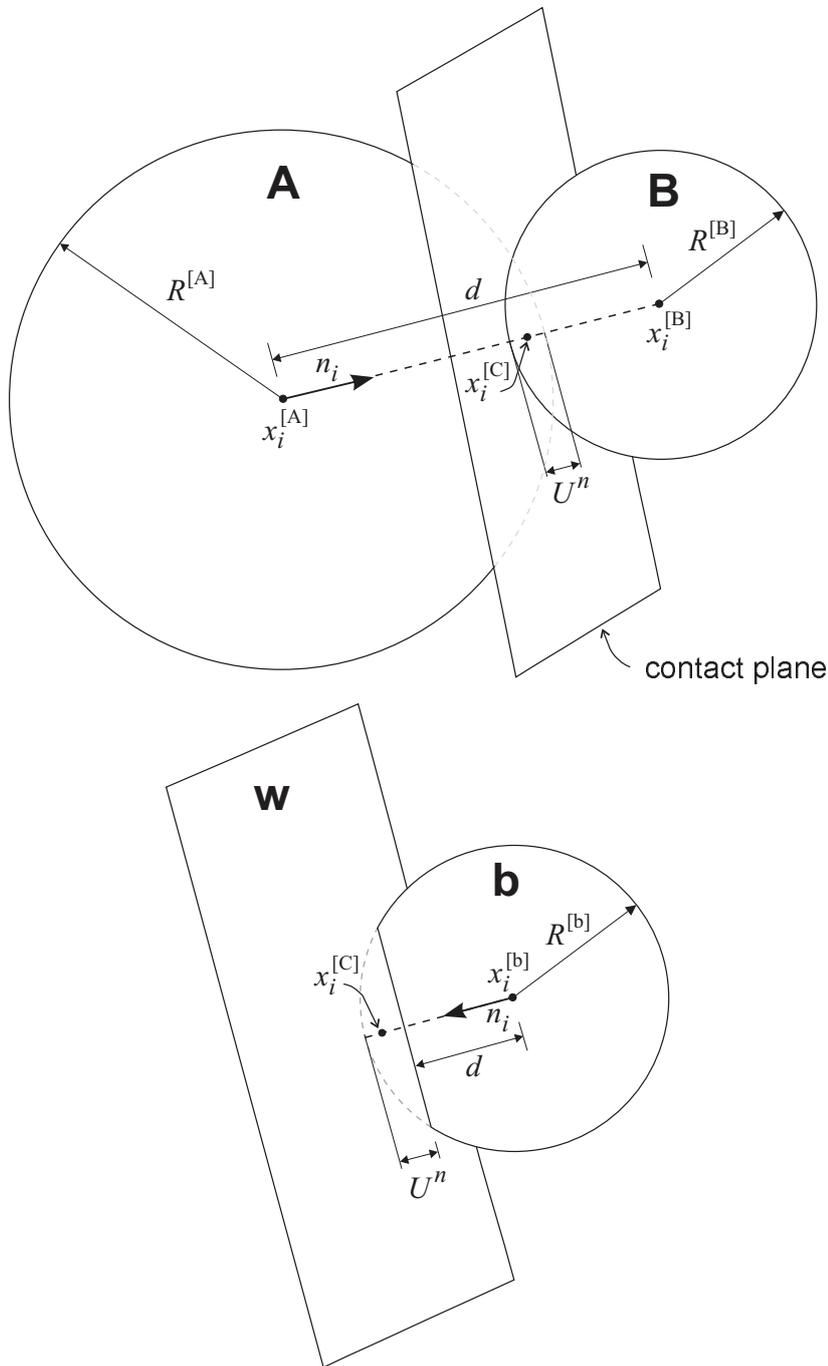
Lei de força-deslocamento

Como foi anteriormente descrito, esta lei relaciona os deslocamentos entre duas entidades com as forças geradas nos seus contactos; as forças componentes ou derivadas (força normal e cortante) da decomposição da força de contato no ponto $x_i^{[c]}$ são utilizadas conjuntamente com as rigidezes correspondentes para calcular os deslocamentos nas duas direções. Na figura 3.1 **A**, **B**, **b** são as representações das partículas, a parede está representada com a letra **W**, nos dois casos U^n representa a penetração entre elementos, n_i é o vector unitário que representa o plano de contato entre partículas ou a direção da distancia menor do centro da partícula com uma parede, o qual é definido como:

$$n_i = \frac{x_i^{[B]} - x_i^{[A]}}{d} \quad (3-1)$$

Onde d é definido como: $d = |x_i^{[B]} - x_i^{[A]}| = \sqrt{(x_i^{[B]} - x_i^{[A]}) (x_i^{[B]} - x_i^{[A]})}$

A sobreposição U^n é definida como:
$$\left\{ \begin{array}{ll} R^{[A]} + R^{[B]} - d, & \text{(partícula-partícula)} \\ R^{[b]} - d, & \text{(partícula-parede)} \end{array} \right\}$$



PUC-Rio - Certificação Digital N° 1112024/CA

Figura 3.1: Representação do contato entre partículas (A-B) e parede-partícula (W-b), Itasca [30]

A posição do ponto de contato é dado por:

$$x_i^{[C]} = \begin{cases} x_i^{[A]} + \left(R^{[A]} - \frac{1}{2}U^n \right) n_i, & \text{(partícula- partícula)} \\ x_i^{[b]} + \left(R^{[b]} - \frac{1}{2}U^n \right) n_i, & \text{(partícula-parede)} \end{cases}$$

E as forças no contato estão definidas como: $F_i = F_i^n + F_i^s$; onde $F_i^n = K^n U^n$; devido a que a rigidez cisalhante k^s é um módulo tangente (representado com minúscula por tal condição), a força cortante é calculada de um modo incremental com respeito ao deslocamento relativo do ponto de contato.

Quando criado o contat a força cortante dele é considerada como zero, e cada incremento no movimento cortante faz um acréscimo na mesma força atualizando em cada “time step” os valores de n_i e $x_i^{[C]}$. Considerando a posição do contato no tempo $t-\Delta t$ e as velocidades angulares no tempo t as forças de rotação nos três eixos estarão definidas como:

$$\left\{ \begin{matrix} F_i \\ F_j \\ F_k \end{matrix} \right\}_{rot.1} = \begin{bmatrix} 1 & -k & j \\ k & 1 & -i \\ -j & i & 1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} F_i^s \\ F_j^s \\ F_k^s \end{matrix} \right\} \quad (3-2)$$

$$\left\{ \begin{matrix} F_i^s \\ F_j^s \\ F_k^s \end{matrix} \right\}_{rot.2} = \begin{bmatrix} 1 & -\omega_k \Delta t & \omega_j \Delta t \\ \omega_k \Delta t & 1 & -\omega_i \Delta t \\ -\omega_j \Delta t & \omega_i \Delta t & 1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} F_i^s \\ F_j^s \\ F_k^s \end{matrix} \right\}_{rot.1} \quad (3-3)$$

Fazendo uso do delta de Kronecker e o simbolo de permutação sendo eles definidos como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i=j; \\ 0, & \text{outros casos} \end{cases} \quad (3-4)$$

$$e_{ijk} = \begin{cases} 0, & \text{se dois índices coincidir ;} \\ 1, & \text{se os índices fossem = } ijk, jki, kij \\ -1, & \text{se os índices fossem = } jik, kji, ikj \end{cases} \quad (3-5)$$

As equações (3-2) e (3-3) podem ser representadas como:

$$\{F_i^s\}_{rot.1} = F_j^s (\delta_{ij} - e_{ijk} c_k) \quad (3-6)$$

$$\{F_i^s\}_{rot.2} = \{F_i^s\}_{rot.1} (\delta_{ij} - e_{ijk}(\omega_k)\Delta t) \quad (3-7)$$

Onde c_k é o vetor resultante do produto dos vetores unitários do contato no tempo t e $t-\Delta t$ e ω_k é a velocidade angular que a sua vez está definida como:

$$(\omega_i) = \frac{1}{2}(\omega_j^{[\Phi^1]} + \omega_j^{[\Phi^2]})n_jn_i \quad (3-8)$$

Para o cálculo da velocidade cortante no contato segue-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned} V_i &= (\dot{x}_i^{[C]})_{\Phi^2} - (\dot{x}_i^{[C]})_{\Phi^1} \\ V_i &= (\dot{x}_i^{[\Phi^2]} + e_{ijk}\omega_j^{[\Phi^2]}(x_k^{[C]} - x_k^{[\Phi^2]})) - (\dot{x}_i^{[\Phi^1]} + e_{ijk}\omega_j^{[\Phi^1]}(x_k^{[C]} - x_k^{[\Phi^1]})) \end{aligned} \quad (3-9)$$

Onde $\dot{x}_i^{[\Phi^j]}$ é a velocidade translacional da partícula e rotacional respectivamente, e as entidades Φ^j representam:

$$\{\Phi^1, \Phi^2\} = \begin{cases} \{A, B\} & \text{partícula-partícula} \\ \{b, W\} & \text{partícula-parede} \end{cases} \quad (3-10)$$

Por conseguintemente a velocidade do contato será:

$$V_i^s = V_i - V_i^n = V_i - V_jn_jn_i \quad (3-11)$$

fazendo uso da equação (3-11), o deslocamento cortante acontecendo no contato em cada “timestep” é calculado por:

$$\Delta U^s = V_i^s \Delta t \quad (3-12)$$

Para depois ser calculado o acréscimo elástico na força cortante:

$$\Delta F^s = -k^s \Delta U^s \quad (3-13)$$

Considerando o atrito entre as entidades (partícula ou parede) a atualização da força cortante é feita por:

$$F^s \longleftarrow \{F_i^s\}_{rot.2} + \Delta F_i^s \leq \mu F^n \quad \mu = \text{Coef. de atrito} \quad (3-14)$$

Depois de satisfazer a relação constitutiva “linear model” entre os contatos (adotado nas simulações do presente trabalho), onde a rigidez normal e cisalhante do contato é definido em função as rigidezes dos corpos $k_n^{[\Phi]}$ $k_s^{[\Phi]}$ da forma seguinte:

$$K^n = \frac{k_n^{[A]}k_n^{[B]}}{k_n^{[A]} + k_n^{[B]}} \quad k^s = \frac{k_s^{[A]}k_s^{[B]}}{k_s^{[A]} + k_s^{[B]}} \quad (3-15)$$

Depois do ajuste anterior a contribuição da força cortante final à força resultante e ao momento nas duas entidades que conformam o contato é calculado por:

$$\begin{aligned} F_i^{[\Phi^1]} &= F_i^{[\Phi^1]} - F_i \\ F_i^{[\Phi^2]} &= F_i^{[\Phi^2]} + F_i \\ M_i^{[\Phi^1]} &= M_i^{[\phi^1]} - e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[\Phi^1]})F_k \\ M_i^{[\Phi^2]} &= M_i^{[\phi^2]} + e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[\Phi^2]})F_k \end{aligned} \quad (3-16)$$

Lei de movimentação

O movimento de uma partícula é determinada pela força resultante e o momento atuante nela, e está representada através de duas equações vetoriais, uma relaciona a força resultante com o movimento translacional 3-17 e a outra relaciona o momento resultante como o movimento rotacional.

$$F_i = m(\ddot{x}_i - g_i) \quad (3-17)$$

Considerando os três eixos de inercia da partícula:

$$\begin{aligned} M_1 &= I_1\dot{\omega}_1 + (I_3 - I_2)\omega_3\omega_2 \\ M_2 &= I_2\dot{\omega}_2 + (I_1 - I_3)\omega_1\omega_3 \\ M_3 &= I_3\dot{\omega}_3 + (I_2 - I_1)\omega_2\omega_1 \end{aligned} \quad (3-18)$$

Onde I_i são os momentos de inercia principais, $\dot{\omega}_i$ são as acelerações angulares e M_i representam os momentos resultantes.

Para partículas esféricas e cilíndricas de raio R dos quais a massa está distribuída uniformemente no volume o centro de massa coincide com o

centro da partícula. Para uma partícula esférica qualquer sistema local de coordenadas relacionado ao centro da partícula representa o sistema de eixos principais, isto é, os três momentos de inércia principais são iguais entre eles. Para uma partícula cilíndrica as velocidades ω_1 e ω_2 são iguais a zero, muito pequenas de modo que são consideradas desprezíveis. Devido a essas considerações a equação 3-18 pode ser simplificada como:

$$M_3 = I\dot{\omega}_3 = (\beta m R^2)\dot{\omega}_3 \quad (3-19)$$

onde:

$$\beta = \begin{cases} 2/5 & \text{(partícula esférica)} \\ 1/2 & \text{(partícula cilíndrica)} \end{cases}$$

As equações de movimentação 3-17 e 3-19 são integradas empregando o procedimento de diferenças finitas centrais envolvendo o “timestep” Δt . As quantidades de \dot{x}_i e ω_3 são computados nos intervalos meios de $t \pm n\Delta t/2$, no entanto as quantidades x_i , \ddot{x}_i , ω_3 , F_i e M_3 são computados no início dos intervalos de $t \pm n\Delta t/2$.

As expressões seguintes descrevem as acelerações rotacionais e translacionais no tempo t em termos dos valores das velocidades nos intervalos meios:

$$\ddot{x}_i^{(t)} = \frac{1}{\Delta t} (\dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)} - \dot{x}_i^{(t-\Delta t/2)}) \quad (3-20)$$

$$\omega_3^{(t+\Delta t/2)} = \omega_3^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{M_3^{(t)}}{I} \right) \Delta t$$

Finalmente as velocidades da equação 3-20 são usadas para atualizar a posição do centro da partícula da forma:

$$x_i^{(t+\Delta t/2)} = x_i^{(t)} + \dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)} \Delta t \quad (3-21)$$

Então o ciclo de cálculo para a lei de movimento pode ser resumido da seguinte maneira: a equação 3-20 é usado para obter $\dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)}$ e $\omega_3^{(t-\Delta t/2)}$ então 3-21 é usado para calcular a posição do centro da partícula. Os valores de $F_i^{(t+\Delta t)}$ e $M_3^{(t+\Delta t)}$ para ser usados no próximo ciclo são calculados através da lei de Força-Deslocamento.

3.1.2

Modelo de contacto do tipo Flat-Joint

A característica do modelo de contato entre partículas como mencionado na seção anterior, fornece a capacidade de simular sistemas mais complexos controlados pelo comportamento micromecânico entre as partículas constituintes. O “Parallel Bond” é um modelo de contato proposto para a simulação de materiais de comportamento frágil como rochas, porém as limitações dos materiais de reproduzir a relação entre a resistência à compressão simples versus a resistência obtida no ensaio brasileiro pode-se referir à falta de resistência à rotação das partículas uma vez que o contacto experimenta a rotura.

O “Flat joint contact model” apresenta duas superfícies imaginárias centradas no ponto de contato posicionado simetricamente na interpenetração das partículas, são estas superfícies que após quebrado o contato permanecem fornecendo resistência à rotação das partículas que as contem (fig. 3.2).

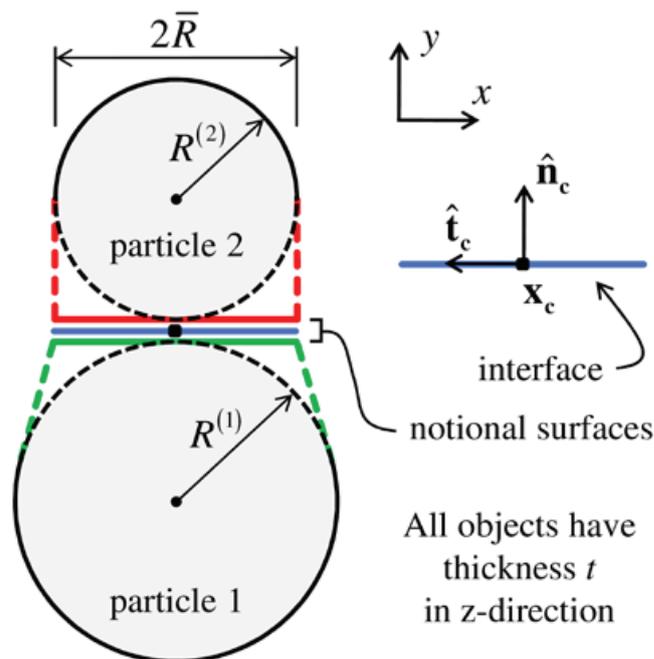


Figura 3.2: Representação geométrica do flat joint contact model [35]

A movimentação relativa das superfícies imaginárias pertencentes a um contato entre partículas está definida por:

$$\dot{U} = \dot{x}_c^{(2)} - \dot{x}_c^{(1)} = \left\{ \dot{x}_c^{(2)} + \omega^{(2)} \times (x_c - x^{(2)}) \right\} - \left\{ \dot{x}_c^{(1)} + \omega^{(1)} \times (x_c - x^{(1)}) \right\} \quad (3-22)$$

$$\dot{\theta} = \omega^{(2)} - \omega^{(1)}$$

Onde x é posição do centro da partícula, \dot{x} é a velocidade translacional. ω é a velocidade rotacional e os números sobrescritos representam as partículas. $\dot{x}_c^{(i)}$ e $\dot{x}^{(i)}$ são as velocidades translacionais da partícula i no contato e no centro da partícula respectivamente (Fig. 3.3).

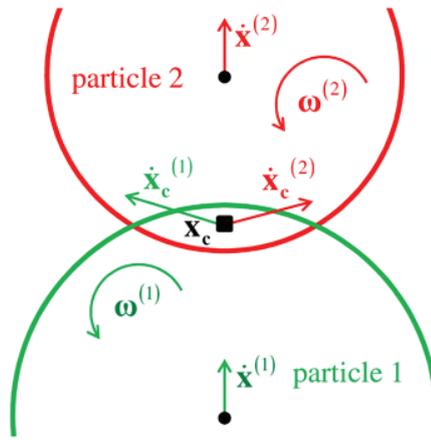


Figura 3.3: Velocidade das superfícies imaginárias do flat-joint no contato [35]

As velocidades relativas podem ser expressadas como:

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \left\{ (\dot{x}_c^{(2)} - \dot{x}_c^{(1)}) \cdot \hat{n}_c \right\} \hat{n}_c + \left\{ (\dot{x}_c^{(2)} - \dot{x}_c^{(1)}) \hat{t}_c \right\} \hat{t}_c \\ &= \dot{U}_n \hat{n}_c + \dot{U}_s \hat{t}_c \\ \dot{\Theta} &= \omega^{(2)} - \omega^{(1)} = \dot{\theta} \hat{k} \end{aligned} \quad (3-23)$$

Onde \dot{U}_n e \dot{U}_s são as velocidades translacionais (normal e tangencial respectivamente) relativas do ponto meio entre as superfícies; $\dot{\theta}$ é a velocidade rotacional relativa (fig 3.4). Durante cada “timestep” os acréscimos do deslocamento e a rotação vem calculados como:

$$\begin{aligned} \Delta U &= (\dot{U}_n \Delta t) \hat{n}_c + (\dot{U}_s \Delta t) \hat{t}_c = \Delta U_n \hat{n}_c + \Delta U_s \hat{t}_c \\ \Delta \Theta &= (\dot{\theta} \Delta t) \hat{k} = \Delta \theta \hat{k} \end{aligned} \quad (3-24)$$

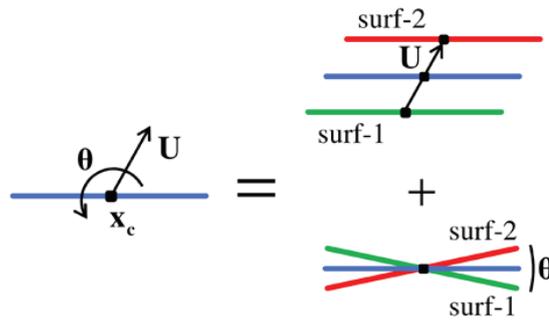


Figura 3.4: Cinemática do contato do tipo flat-joint mostrando a interface (azul) com deslocamentos relativos das superfícies (vermelho e verde) [35]

Uma vez instalado o contato do tipo “flat-joint” o deslocamento e a rotação iniciais entre as superfícies imaginárias são iguais a zero, nesta condição os dois planos coincidem entre eles e cada acréscimo produzido no ciclo de cálculo dos deslocamentos é somado ao total (equação 3-25), a separação relativa entre as superfícies ou “gap” (representado por “ g ” que relaciona as tensões geradas) não é afetada pelo deslocamento cortante relativo entre elas (fig. 3.5) .

$$U_n := U_n + \Delta U_n, \quad U_s := U_s + \Delta U_s, \quad \theta := \theta + \Delta \theta \quad (3-25)$$

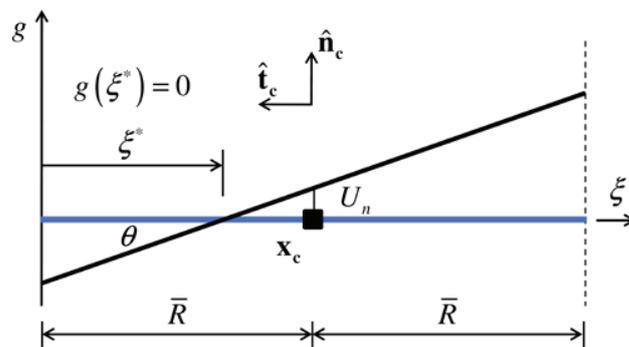


Figura 3.5: “Gap” relativo ao deslocamento da superfície e a interface [35]

Lei de força deslocamento do tipo de contato Flat-Joint

As superfícies imaginárias são segmentadas em um número pre-definido de partes para determinar as forças e momentos desenvolvidas pelo afastamento (se o modelo estivesse ligado) ou inter-penetração relativas ao ponto meio de cada segmento, cada força e momento atuam em cada par de segmentos opostos de uma maneira igual e contrária, para depois ser somadas e atualizar as força e momentos totais no contato (ver fig. 3.6).

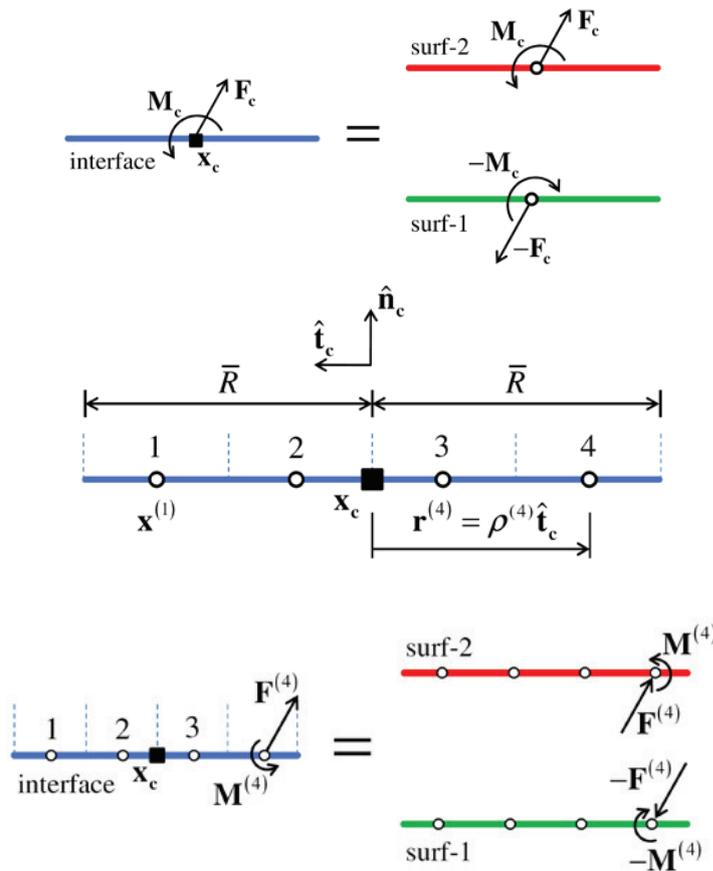


Figura 3.6: Forças atuantes nas superfícies imaginárias e a sua segmentação [35]

Do gráfico 3.6 as forças resultantes da atuação de cada segmento no contato vem da forma:

$$\mathbf{F}_c = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}^{(i)}, \quad \mathbf{M}_c = \sum_{i=1}^N \left\{ (\mathbf{r}^{(i)} \times \mathbf{F}^{(i)}) + \mathbf{M}^{(i)} \right\} \quad (3-26)$$

Onde $\mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}_n$ é o vetor posição e $\mathbf{x}^{(i)}$ é o centroide do segmento (i). Considerando o vetor posição igual a $\rho^{(i)}\hat{t}_c$ onde $\rho^{(i)} = \bar{R} \left(\frac{-2i + 1 + N}{N} \right)$, onde i varia desde 1 até o numero total de segmentos pode-se escrever o momento total da equação 3-26 como:

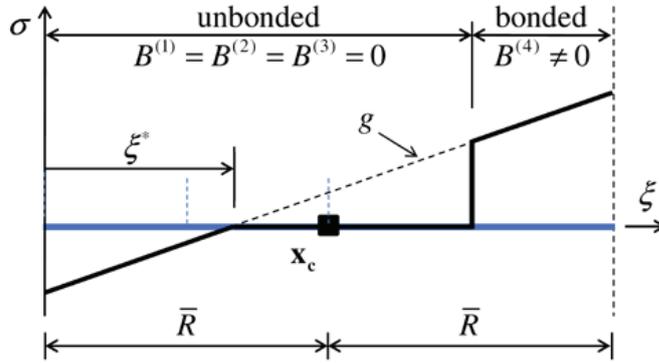


Figura 3.7: Tensões normais na interface para superfícies compostas por quatro segmentos [35]

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_c &= \sum_{i=1}^N \left\{ \rho^{(i)} \hat{t}_c \times [F_n^{(i)} + F_s^{(i)} \hat{t}_c] + \mathbf{M}^{(i)} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ -\rho^{(i)} F_n^{(i)} \hat{k} + \mathbf{M}^{(i)} \right\} \end{aligned} \quad (3-27)$$

A lei generalizada de força-deslocamento atualiza os valores das forças atuantes em cada segmento e se o segmento estivesse ligado a mesma lei atualiza o estado dele a um comportamento friccional só se as forças atuantes ultrapassarem a resistência da ligação; onde as tensões de tração mudam a valores de zero enquanto o “gap” for maior do que zero (ver figura 3.7).

$$\sigma(\xi) = L(\xi) K_n g, \quad \xi \in [0, 2R] \quad (3-28)$$

$$L(\xi) = \begin{cases} 1, & \text{se } \xi \text{ está ligado;} \\ 1, & \text{se } \xi \text{ está desligado e } g < 0; \\ 0, & \text{outros casos} \end{cases}$$

Na equação 3-28, K_n é a rigidez normal do flat-joint, cada segmento tem um área igual a $A^{(i)} = 2\bar{R}t/N$, onde \bar{R} é o raio do contato. As tensões nos centroides dos contactos tem a forma $\sigma^{(i)} = -F_n^{(i)}/A^{(i)}$ onde tensões positivas são consideradas de tração, e $\tau^{(i)} = F_s^{(i)}/A^{(i)}$; o procedimento de cálculo está descrito da seguinte maneira:

1. Cálculo da tensão $\sigma^{(i)}$ baseado no “gap” no final do ciclo de cálculo e no estado de ligação do contato, se o contato estivesse ligado e a tensão calculada ultrapassa a resistência da ligação então esta última é quebrada em tração e o procedimento pula para o passo 3.
2. Cálculo da tensão cisalhante $\hat{\tau}^{(i)'} := \hat{\tau}^{(i)} - K_s \Delta U_{se}$ onde k_s é a rigidez cortante e ΔU_{se} é a porção elástica do acréscimo de deslocamento o qual é determinado considerando o valor do “gap” no centroide do segmento. Se ele estiver ligado então todo o deslocamento é considerado elástico, se não fosse o caso então é apenas a porção de deslocamento onde o gap é negativo. O procedimento agora é diferenciado com respeito do estado da ligação.

- **Segmento desligado (fig. 3.8).** Tendo a resistência ao cisalhamento como:

$$\tau_c^{(i)} = \begin{cases} -\mu \hat{\sigma}^{(i)} & , \text{ quando } \hat{\sigma}^{(i)} < 0 \\ 0 & , \text{ quando } \hat{\sigma}^{(i)} \geq 0 \end{cases} \quad (3-29)$$

Onde μ é o coeficiente de atrito, se o valor da tensão cisalhante calculada é menor ou igual à resistência da ligação do segmento então a tensão calculada passa a ser o valor atual da tensão no centroide do segmento, porém se a tensão calculada ultrapassar a mesma resistência ocorre o deslizamento se atualizando o valor da tensão a:

$$\hat{\tau}^{(i)} := \hat{\tau}^{(i)'} \left(\frac{\tau_c^{(i)}}{|\hat{\tau}^{(i)'}|} \right) \quad (3-30)$$

- **Segmento ligado (fig.3.9)** . Tendo a resistência da ligação da forma: $\tau_c^{(i)} = c_b - \hat{\sigma}^{(i)} \tan \phi_b$ onde c_b e ϕ_b são a coesão o angulo de atrito respectivamente. Se $|\hat{\tau}^{(i)'}| < \tau_c^{(i)}$ então $\hat{\tau}^{(i)} := \hat{\tau}^{(i)'}$, de outra maneira a ligação experimenta a ruptura por cisalhamento mudando os valores de $\hat{\sigma}^{(i)}$ e $\hat{\tau}^{(i)}$ iguais a zero.

3. Cálculo do momento no segmento $M^{(i)}$ considerando o gap (g) no final do ciclo de cálculo e o estado da ligação.

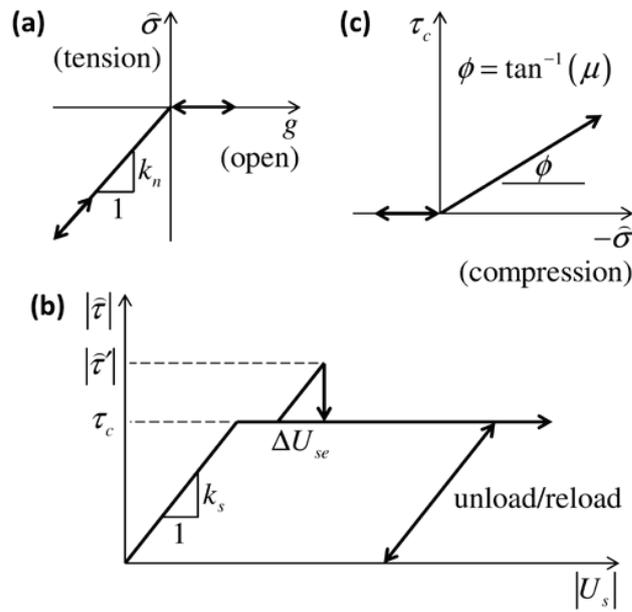


Figura 3.8: Lei de Força-Deslocamento para o segmento desligado (a) tensão normal no centroide do segmento versus o gap (g), (b) tensão cisalhante no centroide do segmento versus o deslocamento relativo, (c) envolvente de ruptura [35]

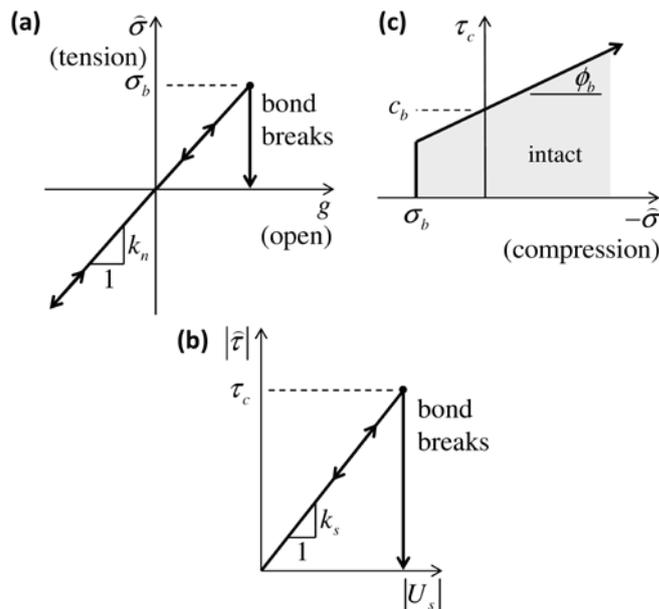


Figura 3.9: Lei de Força-Deslocamento para o segmento ligado (a) tensão normal no centroide do segmento versus o gap (g), (b) tensão cisalhante no centroide do segmento versus o deslocamento relativo, (c) envolvente de ruptura [35]