

4 Método dos Elementos Discretos

4.1 Introdução

O Método dos Elementos Discretos permite a simulação do comportamento mecânico de um meio formado por um conjunto de partículas, as quais interagem através dos seus pontos de contatos (Mellado, 2005). A diferença de outros métodos numéricos disponíveis, como o Método dos Elementos Finitos, este método ainda está em desenvolvimento, com implementações para diferentes áreas específicas. A grande maioria destas implementações são apresentadas em congressos e publicações específicas do caso em estudo. As partículas, que podem ser geradas de forma aleatória, são cilíndricas (no caso 2D) ou esféricas (no caso 3D), nas quais podem-se distinguir as seguintes propriedades básicas que definem o método:

- As partículas são elementos discretos que conformam um sistema complexo de partículas;
- Estes elementos discretos se movem independentemente uns dos outros e interagem entre eles nos seus contatos;
- Neste método, a nível de partícula é usada a mecânica do corpo rígido e os elementos discretos são considerados elementos rígidos entre eles.

O comportamento global do material é governado pelo modelo constitutivo aplicado nos contatos entre as partículas.

O cálculo executado no método alterna entre a aplicação da 2ª Lei de Newton para as partículas e a Lei Força-Deslocamento para os contatos. A segunda Lei de Newton é usada para determinar o movimento de cada partícula a partir das forças do contato e as forças aplicadas na partícula, e, a Lei Força-Deslocamento, é usada para atualizar as forças de contato surgidas do movimento relativo de cada contato.

4.2

O Programa PFC

O Programa *PFC* (*Particle Flow Code*) foi desenvolvido pela *Itasca Consulting Group Inc.* Baseado no Método dos Elementos Discretos, este programa modela o movimento e interação de partículas cilíndricas (*PFC2D*) ou esféricas (*PFC3D*), que podem ser gerados aleatoriamente, e, podem ter raios constantes ou variáveis. Estes raios quando gerados, tem uma distribuição uniforme, no entanto, a distribuição *gaussiana* (normal) também pode ser usada no momento da geração. Conforme o aumento do número de partículas, é necessário ter uma capacidade maior de memória RAM, isto é referido na tabela 4.1 de forma referencial. Quando aumentar o número de contatos se incrementa o uso de memória. A 2ª Lei de Newton é calculada para cada partícula, fornecendo a posição e a velocidade da partícula. A força dos contatos é calculada a partir dos deslocamentos relativos das partículas e do modelo constitutivo utilizado no contato.

RAM disponível (MB)	Número aproximado de partículas*
16	10000
80	50000
160	100000
*Estado compactado (contatos requerem maior memória que as partículas)	

Tabela 4.1: Número máximo de partículas segundo RAM (*PFC3D*)

O procedimento geral de solução é mostrado na figura 4.1, sendo dividido em estágios diferentes. Na configuração do modelo, três componentes fundamentais em um problema podem ser especificados:

- um arranjo de partículas;
- comportamento do contato e propriedades do material;
- contornos e condições iniciais.

O arranjo corresponde a um número de partículas posicionadas e distribuídas de maneira uniforme dentro de uma região previamente estabelecida. As propriedades destas partículas e, o comportamento dos seus contatos, determina o tipo de resposta do modelo quando é aplicada alguma perturbação. Antes de efetuar qualquer simulação é importante definir as condições iniciais de contorno. Ao se aplicar estas, o arranjo de partículas atinge uma condição de equilíbrio inicial. Quando se aplicar uma alteração deste estado (como uma

escavação ou uma mudança nas condições de contorno), a resposta do modelo é calculada. Esta solução é atingida depois de vários passos (*steps*) que são automaticamente controlados pelo programa, mas, também pode ser definido pelo usuário.

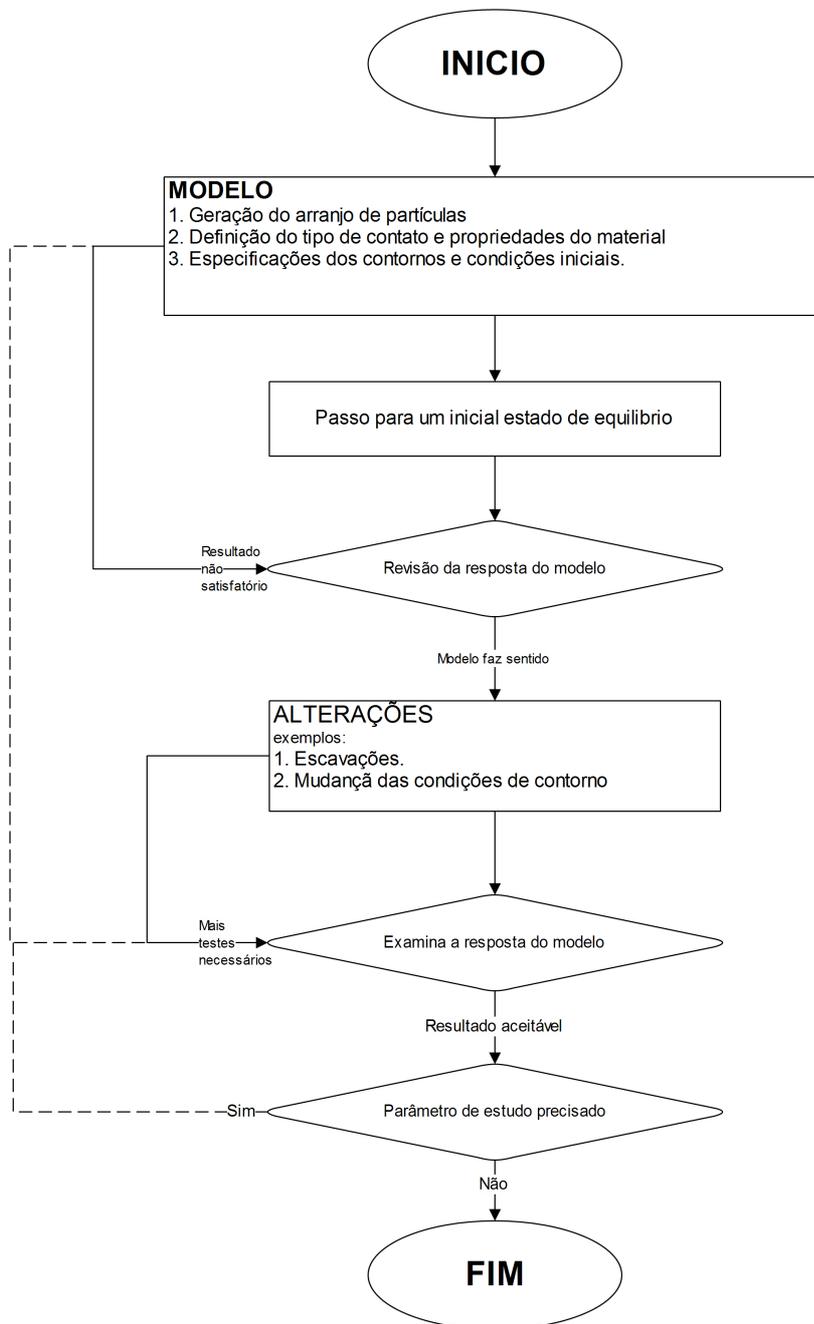


Figura 4.1: Procedimento Geral de Solução (Itasca, 1999a)

O programa *PFC* tem a sua própria linguagem de programação chamado *FISH*, que permite definir e introduzir dentro do modelo novas variáveis, gerar novas geometrias, modelos, servo-controladores, etc; ampliando a potencialidade do programa.

4.3 Formulação do Método dos Elementos Discretos

A fig.4.2 mostra como é o processo de cálculo do método dos elementos discretos. A Lei Força-Deslocamento, determina o valor da força atuante em um contato a partir do deslocamento relativo das partículas. Esta força gerada no contato, é transmitida para cada partícula pela Lei de Movimento. A força transmitida aos centros das partículas gera um deslocamento em cada uma delas. Após este procedimento, a posição de cada partícula é atualizada e o ciclo é repetido.

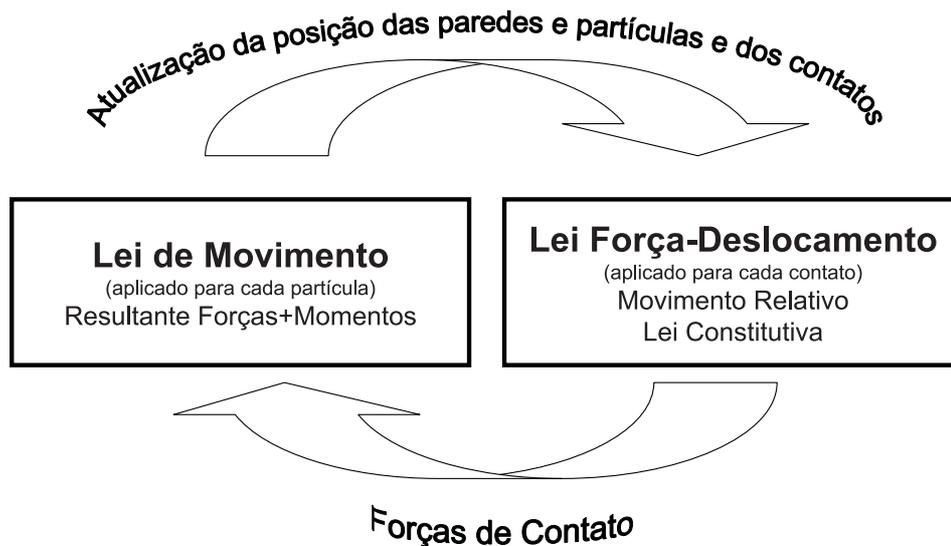


Figura 4.2: Ciclo de Cálculo do Método dos Elementos Discretos (Itasca, 1999a)

Baseado no Manual do Usuário do Programa *PFC* (Itasca, 1999a), pode-se sintetizar a formulação do método em: a 2ª Lei de Newton e a Lei Força-Deslocamento, aplicada nas partículas e nos contatos respectivamente. Nesta formulação são adotadas as seguintes hipóteses:

- As partículas são consideradas corpos rígidos;
- O contato entre as partículas ocorre em uma área muito pequena (pontual);

- No contato tem-se uma tolerância de penetração entre as partículas. A magnitude desta é relacionada com a força do contato através da Lei Força-Deslocamento e é muito pequena em relação ao tamanho das partículas;
- Pode existir uma ligação no contato entre as partículas;
- Todas as partículas são cilíndricas (no caso 2D) ou esféricas (no caso 3D), no entanto, outras geometrias podem ser geradas agrupando partículas.

Na formulação pode-se incluir elementos rígidos ou paredes, as quais podem ter velocidades impostas, deslocamentos e forças. Estas paredes dão as condições de contorno do sistema, e podem compactar ou confinar um arranjo de partículas.

4.3.1

Lei Força-Deslocamento

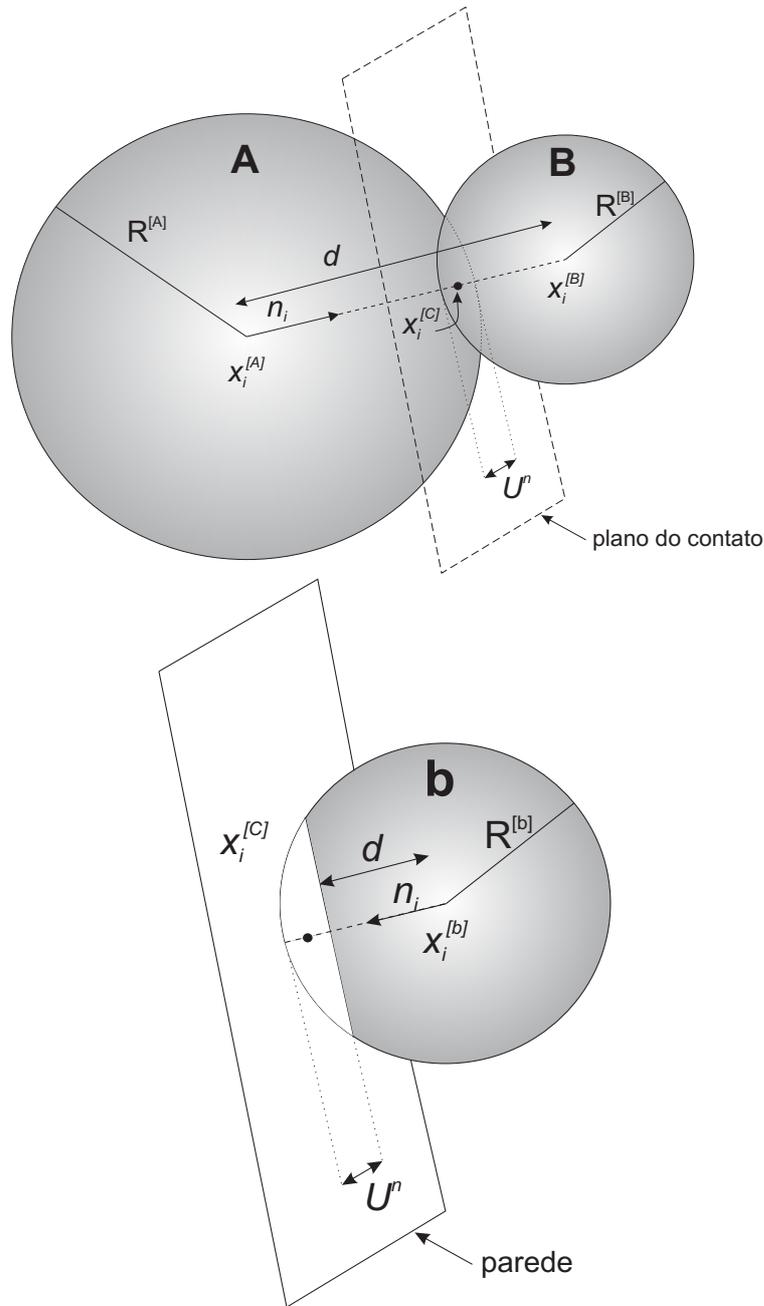
A Lei Força-Deslocamento é aplicada no contato de duas entidades. Definindo como entidade a uma partícula ou parede, o contato pode ser formado então, por duas partículas ou por uma partícula e uma parede, sendo a sua posição representada como $x_i^{[C]}$. Este contato encontra-se em um plano com vetor normal n_i , sendo definido pela reta que une os centros das duas partículas (da partícula A para B). O vetor normal é:

$$n_i = \frac{x_i^{[B]} - x_i^{[A]}}{d} \quad (4-1)$$

sendo d a distancia entre os centros das duas entidades em contato. Este valor pode ser determinado da forma seguinte:

$$d = |x_i^{[B]} - x_i^{[A]}| = \sqrt{(x_i^{[B]} - x_i^{[A]})(x_i^{[B]} - x_i^{[A]})} \quad (4-2)$$

Se o contato for partícula-parede, o vetor normal terá a direção da reta de menor distancia entre o centro da partícula e a parede. A superposição de uma partícula sobre outra, é definido pelo deslocamento relativo das partículas na direção normal, e é dada pela equação 4-3. A superposição é representado por U^n . Estas definições podem ser visualizar na figura 4.3.



PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0812408/CA

Figura 4.3: Nomenclatura partícula-partícula, partícula-parede (Itasca, 1999a).

A superposição das partículas em contato U_n é possível de ser determinada, conhecendo os raios das partículas em contato e, a distância inicial entre elas.

$$U^n = \begin{cases} R^{[A]} + R^{[B]} - d, & \text{(partícula-partícula)} \\ R^{[b]} - d, & \text{(partícula-parede)} \end{cases} \quad (4-3)$$

Onde $R^{[\phi]}$ e o raio da entidade ϕ . Após a definição destas variáveis, a posição do contato pode ser determinada da forma seguinte:

$$x_i^{[C]} = \begin{cases} x_i^{[A]} + (R^{[A]} - \frac{1}{2}U^n)n_i, & \text{(partícula-partícula)} \\ x_i^{[b]} + (R^{[b]} - \frac{1}{2}U^n)n_i, & \text{(partícula-parede)} \end{cases} \quad (4-4)$$

A força gerada no contato é resultado da superposição de partículas. Esta pode ser no sentido normal ou cisalhante. A Força total no contato é a soma destas, sendo a sua magnitude dependente da lei de rigidez adotada.

$$F_i = F_i^n + F_i^s \quad (4-5)$$

As partículas atuam como se fossem unidas por molas nos seus contatos. Baseado neste critério, a força gerada no contato será o produto da deformação da mola pela sua rigidez. Assim, o deslocamento no sentido normal, que seria a deformação da mola nessa orientação, é a superposição. Sendo a rigidez normal do contato igual a K^n , a força normal é:

$$F_i^n = K^n U^n n_i \quad (4-6)$$

Para o caso da força cisalhante, a deformação da mola nessa direção seria o deslocamento lateral do contato. Quando o contato é formado, o valor total da força cisalhante é zero. Cada deslocamento cisalhante subsequente incrementa a força. Neste sentido, para determinar a força cisalhante, são consideradas a força gerada pelo deslocamento translacional do contato e, a força gerada pela rotação das partículas. Sendo k^s a rigidez cisalhante, as forças rotacionais são definidas como:

$$\{F_i^s\}_{rot.1} = F_j^s (\delta_{ij} - e_{ijk} e_{kmn} n_m^{[OLD]} n_n) \quad (4-7)$$

$$\{F_i^s\}_{rot.2} = \{F_i^s\}_{rot.1} (\delta_{ij} - e_{ijk} (\omega_k) \Delta t) \quad (4-8)$$

onde $n_m^{[OLD]}$ é o vetor unitário normal, referido ao passo anterior e, ω_k é, a velocidade angular das duas partículas na nova direção normal. A velocidade angular é definida pela equação 4-9:

$$(\omega_i) = \frac{1}{2} (\omega_j^{[\phi^1]} + \omega_j^{[\phi^2]}) n_j n_i \quad (4-9)$$

$$\{\phi^1, \phi^2\} = \begin{cases} \{A, B\}, & \text{partícula-partícula} \\ \{b, \omega\}, & \text{partícula-parede} \end{cases} \quad (4-10)$$

onde $\omega_i^{[\phi^j]}$ é a velocidade angular da partícula ϕ^j (equação 4-10). As equações 4-7 e 4-8 usam para a sua determinação duas ferramentas matemáticas: o delta

de Kronecker (equação 4-11) e o símbolo da permutação (equação 4-12). Estas são definidas da seguinte forma:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j; \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (4-11)$$

$$e_{ijk} = \begin{cases} 0, & \text{se dois índices coincidem;} \\ +1, & \text{se } i, j, k \text{ permuta entre } 1, 2, 3; \\ -1, & \text{outro caso} \end{cases} \quad (4-12)$$

Usando a permutação, o produto vetorial das normais $c = n^{[OLD]} \times n$ é da forma seguinte:

$$c_k = e_{kmn} n_m^{[OLD]} n_n \quad (4-13)$$

Assim, substituindo a equação 4-13 na equação 4-7, as equações 4-7 e 4-8 podem ser reescritas como:

$$F_{rot1}^s = \begin{bmatrix} 1 & -c_3 & c_2 \\ c_3 & 1 & -c_1 \\ -c_2 & c_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1^s \\ F_2^s \\ F_3^s \end{bmatrix} \quad (4-14)$$

$$F_{rot2}^s = \begin{bmatrix} 1 & -\bar{\omega}_3 \Delta t & \bar{\omega}_2 \Delta t \\ \bar{\omega}_3 \Delta t & 1 & -\bar{\omega}_1 \Delta t \\ -\bar{\omega}_2 \Delta t & \bar{\omega}_1 \Delta t & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{1rot1}^s \\ F_{2rot1}^s \\ F_{3rot1}^s \end{bmatrix} \quad (4-15)$$

Logo, após da determinação da força rotacional, é preciso saber o valor da força gerada pelo movimento translacional do contato. No caso da força normal, o deslocamento foi definido como a superposição U^n , sendo calculado diretamente em função dos raios das partículas e a distância entre os seus centros. No caso do deslocamento cisalhante U_i^s , a determinação dela é feita usando as velocidades das partículas, sendo este cálculo da forma seguinte:

$$\begin{aligned} V_i &= (\dot{x}_i^{[C]})_{\phi^2} - (\dot{x}_i^{[C]})_{\phi^1} \\ V_i &= (\dot{x}_i^{[\phi^2]} + e_{ijk} \omega_j^{[\phi^2]} (x_k^{[C]} - x_k^{[\phi^2]})) - (\dot{x}_i^{[\phi^1]} + e_{ijk} \omega_j^{[\phi^1]} (x_k^{[C]} - x_k^{[\phi^1]})) \end{aligned} \quad (4-16)$$

onde $\dot{x}_i^{[\phi^j]}$ é a velocidade translacional da partícula ϕ^j . A velocidade do contato é definida em termos da velocidade normal e cisalhante, sendo a componente cisalhante descrita na equação 4-17:

$$V_i^s = V_i - V_i^n = V_i - V_j n_j n_i \quad (4-17)$$

Com a velocidade cisalhante, é possível determinar o deslocamento incremental

cisalhante no contato com a equação 4-18, que ocorre para cada Δt :

$$\Delta U_i^s = V_i^s \Delta t \quad (4-18)$$

assim, pode-se determinar o incremento da força cisalhante com a equação 4-19:

$$\Delta F_i^s = -k^s \Delta U_i^s \quad (4-19)$$

A força cisalhante do contato na equação 4-20 é definida como a soma da força gerada pela rotação no início do Δt (*timestep*) com o valor da força incremental calculada na equação 4-19:

$$F_i^s = \{F_i^s\}_{rot.2} + \Delta F_i^s \quad (4-20)$$

Determinada a força do contato, estas tem que ser corrigidas segundo o modelo constitutivo adotado no contato. Depois desta correção, a força final do contato é transferida para as partículas seguindo as equações:

$$\begin{aligned} F_i^{[\phi^1]} &= F_i^{[\phi^1]} - F_i \\ F_i^{[\phi^2]} &= F_i^{[\phi^2]} + F_i \\ M_i^{[\phi^1]} &= M_i^{[\phi^1]} - e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[\phi^1]})F_k \\ M_i^{[\phi^2]} &= M_i^{[\phi^2]} + e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[\phi^2]})F_k \end{aligned} \quad (4-21)$$

onde $F_i^{[\phi^j]}$ e $M_i^{[\phi^j]}$ são a força e momento aplicado para uma partícula ϕ^j .

4.3.2 Modelos Constitutivos de Contato

O comportamento geral de um material pode ser simulado mediante a definição de um modelo constitutivo nos contatos das partículas. O modelo constitutivo atuante em um contato, consiste de três partes: o modelo de rigidez, o modelo de deslizamento e, o modelo de ligação. Existem vários tipos de modelos usados que podem ser visualizados na figura 4.4.

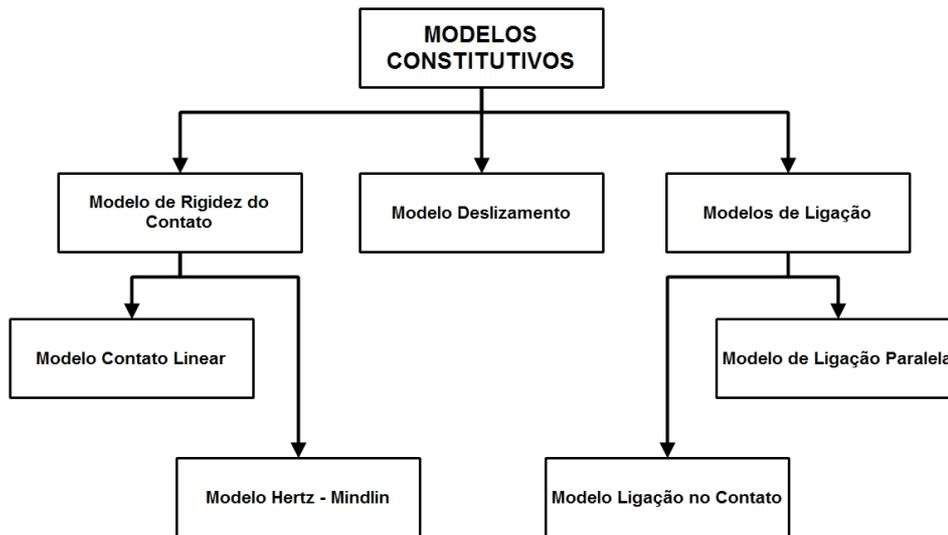


Figura 4.4: Modelos Constitutivos de Contato

4.3.3 Modelo de Rigidez do Contato

A força gerada no contato entre duas partículas é mostrada nas equações 4-6 4-20. As forças normal e cisalhante são obtidas a partir dos deslocamentos relativos entre as partículas e o seu respectivo valor de rigidez no contato. Esta rigidez pode ter diferentes valores, dependendo do tipo de modelo utilizado.

- O **Modelo Linear** é definido pela rigidez normal k_n , e pela rigidez cisalhante k_s . Estes parâmetros têm unidades de força por deslocamento. Esta rigidez é calculada a partir dos valores de rigidez normal e cisalhante das partículas em contato, sendo estas consideradas como duas molas em série. Assim, a rigidez normal do contato é definida como:

$$K^n = \frac{k_n^{[A]} k_n^{[B]}}{k_n^{[A]} + k_n^{[B]}} \quad (4-22)$$

e a rigidez cisalhante como:

$$k^s = \frac{k_s^{[A]} k_s^{[B]}}{k_s^{[A]} + k_s^{[B]}} \quad (4-23)$$

neste tipo de modelo, a rigidez normal k^n é igual a rigidez normal tangente, sendo:

$$k^n \equiv \frac{dF^n}{dU^n} = \frac{d(K^n U^n)}{dU^n} = K^n \quad (4-24)$$

- O **Modelo Hertz-Midlin** é um tipo de contato não linear. Este contato é definido pelos parâmetros G e ν (modulo de cisalhamento e o coeficiente de Poisson), não sendo recomendado o seu uso quando existir algum tipo de ligação entre as partículas. A rigidez normal do contato é dada pela seguinte expressão:

$$K^n = \frac{2\langle G \rangle \sqrt{2\bar{R}}}{3(1 - \langle \nu \rangle)} \sqrt{U^n} \quad (4-25)$$

e a rigidez cisalhante do contato é dada por:

$$k^s = \frac{2(\langle G \rangle^2 3(1 - \langle \nu \rangle) \bar{R})^{1/3}}{2 - \langle \nu \rangle} |F_i^n|^{1/3} \quad (4-26)$$

onde U^n é, a sobreposição das partículas e $|F_i^n|$ é, a magnitude da força normal no contato. As variáveis dadas nas equações 4-25 e 4-26 são definidas segundo as entidades em contato. Para o contato partícula-partícula estas variáveis são:

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \frac{2R^{[A]}R^{[B]}}{R^{[A]}+R^{[B]}} \\ \langle G \rangle &= \frac{1}{2}(G^{[A]} + G^{[B]}) \\ \langle \nu \rangle &= \frac{1}{2}(\nu^{[A]} + \nu^{[B]}) \end{aligned} \quad (4-27)$$

no caso do contato partícula-parede, as variáveis são definidas da forma seguinte:

$$\begin{aligned} \bar{R} &= R^{[particula]} \\ \langle G \rangle &= G^{[particula]} \\ \langle \nu \rangle &= \nu^{[particula]} \end{aligned} \quad (4-28)$$

sendo R o raio da partícula e os índices $[A]$ e $[B]$ denotam duas partículas em contato. A rigidez normal k^n é definida como:

$$k^n \equiv \frac{dF^n}{dU^n} = \frac{3}{2}K^n \quad (4-29)$$

Pode-se apreciar que diferentemente do modelo anterior, os valores de rigidez não são constantes. Eles dependem da força normal e da sobreposição das partículas.

4.3.4

Modelo do Deslizamento

O modelo de deslizamento é uma propriedade das entidades em contato, podendo ser este entre duas partículas ou partícula-parede. Este modelo está sempre ativo a menos que exista algum tipo de ligação entre as entidades, sendo neste caso substituído pelo modelo de contato. O principal parâmetro neste modelo é o coeficiente de atrito μ , que corresponde ao valor mínimo de atrito entre as duas entidades. Assim, baseado no critério de Mohr-Coulomb, se define que:

$$F_{max}^s = \mu |F_i^n| \quad (4-30)$$

se $|F_i^s| > F_{max}^s$, a força cisalhante F_i^s estaria limitada pelo valor de F_{max}^s , sendo esta:

$$F_i^s = F_{max}^s \frac{F_i^s}{|F_i^s|} \quad (4-31)$$

4.3.5

Modelo de Ligação de Contato

Duas partículas podem estar ligadas mediante um tipo de contato. Esta ligação poderia ser definida ou imaginada como duas partículas coladas no ponto de contato. Nesse contexto, dois tipos de contato são definidos: Ligação de Contato (*contact-bond*) que é um contato pontual e que só transmite forças e, a Ligação Paralela (*parallel-bond*), onde as duas partículas são unidas por um elemento finito que atua como um cimento entre as partículas, que pode transmitir força e momentos.

- A **Ligação de Contato** pode ser representada como duas molas atuando na direção normal e cisalhante no contato entre duas partículas. Estas duas molas possuem uma resistência à ruptura. Quando a tensão normal (tração) for igual ou maior à resistência normal da ligação do contato, esta ligação é quebrada em ambas direções, normal e cisalhante, e, as forças atuantes no contato são zeradas. A figura 4.5 mostra o comportamento do modelo na direção normal. Quando $U^n > 0$ tem-se sobreposição de partículas. Nesta condição, a ruptura da ligação do contato, ocasionada pela força normal gerada, não acontece. Definindo como F_n a força normal e F_c^n , a força normal máxima que pode resistir a ligação, estabelece-se que a ruptura vai acontecer quando $F^n > 0$ (tração) e $F^n \geq F_c^n$ (Itasca, 1999a). A força de tração gerada na direção normal aparece como consequência do deslocamento relativo das partículas.

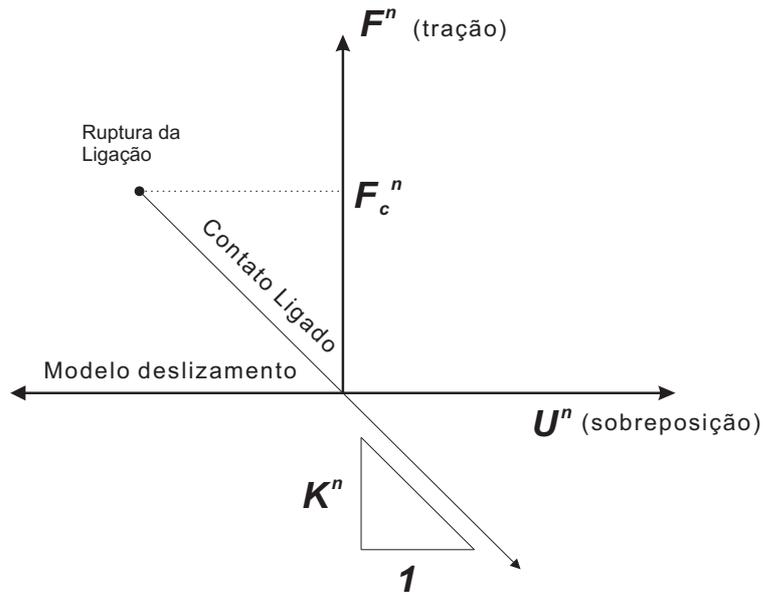


Figura 4.5: Componente normal da força de contato (Itasca, 1999a)

Logo, definindo F_s como a força cisalhante gerada no contato e, F_c^s a força máxima suportada na ligação do contato, temos que, se o valor da $F^s \gg F_c^s$, a ligação nesta direção é quebrada, mas as forças não são modificadas como no caso anterior, desde que o valor da força cisalhante não seja maior do que o valor obtido no modelo do deslizamento. Após a ruptura, o valor da força cisalhante é limitada pelo modelo de deslizamento (figura 4.6).

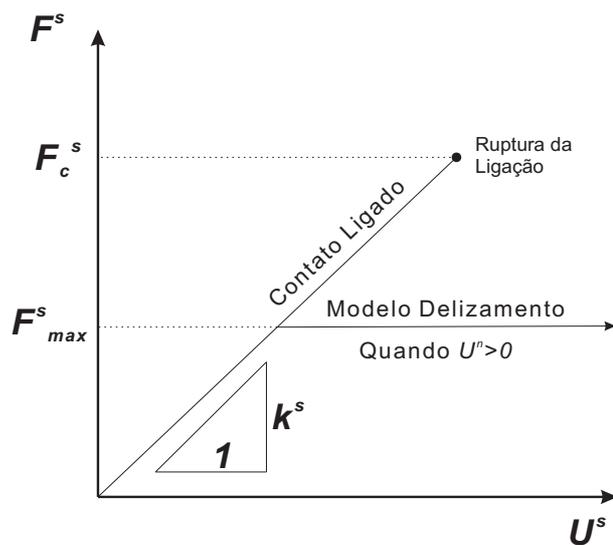


Figura 4.6: Componente cisalhante da força de contato (Itasca, 1999a)

- A **Ligação Paralela** descreve o comportamento de um elemento finito que une a duas partículas como um cimentante. Este tipo de contato estabelece uma interação elástica entre as partículas que atuam em paralelo com o contato de ligação descrito no ponto anterior. O contato paralelo pode transmitir forças e momentos nas partículas, diferente da ligação de contato que transmite somente força. A força e o momento associado com o contato paralelo são denotados como \bar{F}_i e \bar{M}_i (figura 4.7). O contato paralelo é representado como um disco, com raio definido pelo menor dos raios das partículas em contato. Adota-se por convenção que as forças atuam na partícula B para a sua representação.

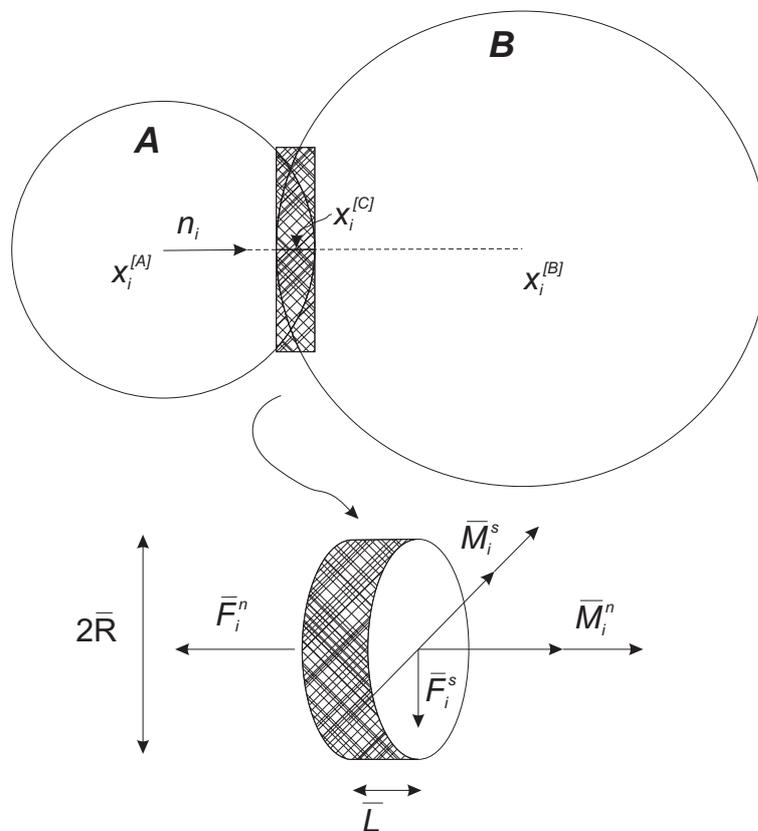


Figura 4.7: Ligação Paralela (Itasca, 1999a).

A força e o momento podem ser definidos em função das suas componentes normal e cisalhante. Estes vetores são:

$$\begin{aligned} \bar{F}_i &= \bar{F}_i^n + \bar{F}_i^s \\ \bar{M}_i &= \bar{M}_i^n + \bar{M}_i^s \end{aligned} \tag{4-32}$$

sendo \bar{F}_i^n , \bar{F}_i^s , \bar{M}_i^n e \bar{M}_i^s as forças e momentos na direção normal e cisalhante respectivamente. Estas forças são inicializadas na geração do contato paralelo. O incremento destas forças são consequência de

deslocamentos e rotações relativas das partículas. Estes incrementos podem ser calculados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Delta \bar{F}_i^n &= (-\bar{k}^n A \Delta U^n) n_i \\ \Delta \bar{F}_i^s &= -\bar{k}^s A \Delta U_i^n\end{aligned}\quad (4-33)$$

onde $\Delta U_i = V_i \Delta t$. Da mesma forma, pode-se calcular os incrementos nos momentos:

$$\begin{aligned}\Delta \bar{M}_i^n &= (-\bar{k}^s J \Delta \theta^n) n_i \\ \Delta \bar{M}_i^s &= -\bar{k}^n I \Delta \theta_i^s\end{aligned}\quad (4-34)$$

onde $\Delta \theta_i = (\omega_i^{[B]} - \omega_i^{[A]}) \Delta t$, e A é a área do disco do contato paralelo. O valor de J é o momento polar de inércia da seção do disco e I é, o momento de inércia da seção do disco com eixo no contato e na direção de $\Delta \theta_i^s$. Estes valores são dados por:

$$\begin{aligned}A &= \pi \bar{R}^2 \\ J &= \frac{1}{2} \pi \bar{R}^4 \\ I &= \frac{1}{4} \pi \bar{R}^4\end{aligned}\quad (4-35)$$

A força normal e cisalhante podem ser calculadas por:

$$\begin{aligned}\bar{F}_i^n &= \bar{F}^n n_i + \Delta \bar{F}_i^n \\ \bar{F}_i^s &= \{\bar{F}_i^s\}_{rot.2} + \Delta \bar{F}_i^s\end{aligned}\quad (4-36)$$

e o valor do momento é calculado por:

$$\begin{aligned}\bar{M}_i^n &= \bar{M}^n n_i + \Delta \bar{M}_i^n \\ \bar{M}_i^s &= \{\bar{M}_i^s\}_{rot.2} + \Delta \bar{M}_i^s\end{aligned}\quad (4-37)$$

onde $\{\}_{rot.2}$ é atualizado nas equações 4-7 e 4-8. O valor máximo da tensão normal e cisalhante atuando no contato é calculado da forma seguinte:

$$\begin{aligned}\sigma_{max} &= \frac{-\bar{F}^n}{A} + \frac{|\bar{M}_i^s|}{I} \bar{R} \\ \tau_{max} &= \frac{-\bar{F}_i^s}{A} + \frac{|\bar{M}_i^n|}{J} \bar{R}\end{aligned}\quad (4-38)$$

Quando $\sigma_{max} \geq \bar{\sigma}_c$ ou $\tau_{max} \geq \bar{\tau}_c$, a ligação paralela no contato rompe, onde $\bar{\sigma}_c$ e $\bar{\tau}_c$ são definidas como as resistências normal e cisalhante do contato paralelo.

A contribuição destas forças na força e momento resultante para cada uma das duas partículas é dada por:

$$\begin{aligned}F_i^{[A]} &= F_i^{[A]} - \bar{F}_i \\ F_i^{[B]} &= F_i^{[B]} + \bar{F}_i \\ M_i^{[A]} &= M_i^{[A]} - e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[A]}) \bar{F}_k - \bar{M}_i \\ M_i^{[B]} &= M_i^{[B]} + e_{ijk}(x_j^{[C]} - x_j^{[B]}) \bar{F}_k + \bar{M}_i\end{aligned}\quad (4-39)$$

4.3.6

Lei de Movimento

Após o cálculo da força do contato e a sua contribuição para cada partícula (equações 4-21 e 4-39), o movimento das partículas pode ser determinado. O movimento translacional pode ser descrito em termos de posição x_i , velocidade \dot{x}_i , e aceleração \ddot{x}_i , e, o movimento rotacional em termos da sua velocidade angular ω_i e aceleração angular $\dot{\omega}_i$.

Assim, o movimento translacional é calculado como:

$$F_i = m(\ddot{x}_i - g_i) \quad (4-40)$$

sendo F_i a força resultante de todas as forças externas atuantes na partícula, m igual a massa da partícula e, g_i é a aceleração da gravidade.

A rotação pode ser escrita como:

$$M_i = \dot{H}_i \quad (4-41)$$

onde M_i é o momento resultante atuante na partícula e H_i o momento angular da partícula. Esta equação 4-41 pode ser estendida utilizando a equação de Euler para o movimento:

$$\begin{aligned} M_1 &= I_1 \dot{\omega}_1 + (I_3 - I_2) \omega_3 \omega_2 \\ M_2 &= I_2 \dot{\omega}_2 + (I_1 - I_3) \omega_1 \omega_3 \\ M_3 &= I_3 \dot{\omega}_3 + (I_2 - I_1) \omega_2 \omega_1 \end{aligned} \quad (4-42)$$

Em um sistema global, a equação 4-42 pode ser escrita como:

$$M_i = I \dot{\omega}_i = \left(\frac{2}{5} m R^2\right) \dot{\omega}_i \quad (4-43)$$

As equações de movimento dadas nas equações 4-41 e 4-43 são integradas usando o procedimento de diferenças finitas centrais que envolve um valor Δt (*timestep*). Os valores de \dot{x}_i e ω_i são calculados para médios intervalos de $t \pm n\Delta t/2$, no entanto, os valores x_i , \ddot{x}_i , $\dot{\omega}_i$, F_i e M_i são calculados em intervalos primários $t \pm n\Delta t$. As acelerações são calculadas como:

$$\ddot{x}_i^{(t)} = \frac{1}{\Delta t} (\dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)} - \dot{x}_i^{(t-\Delta t/2)}) \quad (4-44)$$

$$\dot{\omega}_i^{(t)} = \frac{1}{\Delta t} (\omega_i^{(t+\Delta t/2)} - \omega_i^{(t-\Delta t/2)}) \quad (4-45)$$

Estas equações podem ser substituídas nas equações 4-40 e 4-43 e, determi-

nando as velocidades para o tempo $t + \Delta t/2$ tem-se como resultado:

$$\dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)} = \dot{x}_i^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{F_i^{(t)}}{m} + g_i\right)\Delta t \quad (4-46)$$

$$\omega_i^{(t+\Delta t/2)} = \omega_i^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{M_i^{(t)}}{I}\right)\Delta t \quad (4-47)$$

Finalmente, a velocidade mostrada nas equações acima é usada para atualizar a posição do centro da partícula, sendo determinar da seguinte forma:

$$x_i^{(t+\Delta t)} = x_i^{(t)} + \dot{x}_i^{(t+\Delta t/2)}\Delta t \quad (4-48)$$

4.4

Micro e Macro-parâmetros na Modelagem de Ensaios Triaxiais

Um arranjo de partículas é utilizado para modelar uma amostra de rocha, sendo as suas partículas unidas nos seus pontos de contatos por um tipo de ligação cujo comportamento é simulado pelo método dos elementos discretos. Estas partículas, como foi referido linhas acima, podem ser discos (para o caso $2D$) e esféricas (para o caso $3D$). As micro-propriedades estão referidas nas propriedades de rigidez e resistência aplicados nas partículas e contatos e o dano neles é representado pela ruptura da ligação (Potyondy & Cundall, 2003). Quando uma carga é aplicada na amostra, os contatos vão se deformar até atingir o seu valor máximo de resistência. Quando o contato não pode resistir à força aplicada, o contato rompe, unindo-se com outras ligações quebradas, formando uma macro fissura. O comportamento de um material assim como as suas macro-propriedades dependem das micro-propriedades das partículas que o compõem.

Para o caso da presente pesquisa, foi utilizado o modelo de ligação paralelo, sendo este uma representação aproximada do comportamento físico de algum cimentante atuante no contato entre duas partículas, unindo-as uma a outra (Itasca, 1999b). As micro-propriedades utilizadas neste caso são:

- $\rho \rightarrow$ densidade da partícula (kg/m^3);
- $D_{min}/D_{max} \rightarrow$ relação entre o diâmetro máximo e mínimo da partícula;
- $E_c \rightarrow$ Modulo de deformação da partícula (GPa);
- $k_n/k_s \rightarrow$ relação entre a rigidez normal e a rigidez cisalhante na partícula;
- $\mu \rightarrow$ coeficiente de atrito da partícula;
- $\bar{\lambda} \rightarrow$ múltiplo do raio do contato por ligação paralela;
- $\bar{E}_c \rightarrow$ módulo de deformação do contato por ligação paralela (GPa);

- $\bar{k}^n/\bar{k}^s \rightarrow$ relação entre a rigidez normal e rigidez cisalhante da ligação paralela no contato;
- $\bar{\sigma}_c \rightarrow$ resistência normal do contato por ligação paralela (*MPa*);
- $\bar{\tau}_c \rightarrow$ resistência cisalhante do contato por ligação paralela (*MPa*).

Destes parâmetros, o E_c , (k_n/k_s) e μ correspondem às partículas e $\bar{\lambda}$, (\bar{k}^n/\bar{k}^s) , $\bar{\sigma}_c$ e $\bar{\tau}_c$ correspondem ao cimentante. Em ambos os casos, não foi introduzido o valor de rigidez. Este parâmetro é obtido através do modulo de deformação. Potyondy e Cundall (Potyondy & Cundall, 2003) estabelecem as seguintes relações para a obtenção destas propriedades:

$$k_n = \begin{cases} 2E_c, & PFC2D \\ 4RE_c, & PFC3D \end{cases} \quad (4-49)$$

$$k_s = \frac{k_s}{k_n/k_s} \quad (4-50)$$

$$\bar{k}^n = \frac{\bar{E}_c}{R^{(A)} + R^{(B)}} \quad (4-51)$$

$$\bar{k}^s = \frac{\bar{k}^n}{\bar{k}^n/\bar{k}^s} \quad (4-52)$$

onde R^ϕ refere-se ao raio das partículas. O tipo de contato em referência atua em paralelo com o tipo de contato por ligação ou tipo deslocamento. A representação deste tipo de contato é um disco paralelo ao plano de contato. O raio deste disco é definido como \bar{R} e depende de $\bar{\lambda}$ e dos raios das partículas. Assim, o valor de \bar{R} é:

$$\bar{R} = \bar{\lambda} \min(R^{(A)}, R^{(B)}) \quad (4-53)$$

Com estes valores e, considerando as equações 4-36 e 4-37, é possível resolver a equação 4-38. A condição de ruptura da ligação do contato é atingida quando $\sigma_{max} \gg \bar{\sigma}_c$ e $\tau_{max} \gg \bar{\tau}_c$.

Para o caso de um modelo contínuo, a entrada de propriedades do material (como o modulo de deformação e a resistência), pode ser derivada diretamente de medições em amostras de laboratório. Isto não pode ser aplicado no meio discreto. As macro-propriedades do material dependem da interação das micro-propriedades das partículas (Potyondy & Cundall, 2003). Na atualidade, não existe alguma formulação matemática que relacione estes dois grupos de propriedades, sendo estas correlacionadas por calibração, a partir de ensaios

de laboratório. As micro-propriedades são ajustadas até obter uma melhor representação dos macro-parâmetros do material. A correlação é feita mediante simulações de ensaios triaxiais, onde é possível obter a curva tensão-deformação e os parâmetros de coesão (c) e atrito (ϕ) do material.