



Douglas Pinto de Oliveira

**Implementação de um código numérico
tridimensional para simulação de processos
de fraturamento em rochas**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil e Ambiental da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Coorientador: Luis Arnaldo Mejía Camones

Rio de Janeiro

Maio de 2020



Douglas Pinto de Oliveira

**Implementação de um código numérico
tridimensional para simulação de processos
de fraturamento em rochas**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo.

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Orientador

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental – PUC-Rio

Luis Arnaldo Mejía Camones

Coorientador

RockEng Inc.

Prof^a. Raquel Quadros Velloso

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental – PUC-Rio

Prof. Rodrigo Peluci de Figueiredo

Universidade Federal de Ouro Preto – UFOP

Rio de Janeiro, 29 de maio de 2020

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização do autor, do orientador e da universidade.

Douglas Pinto de Oliveira

Graduou-se em Engenharia Civil pela Unigranrio (Universidade do Grande Rio) em 2016. Ingressou no Mestrado em Engenharia Civil com ênfase em Geotecnia na PUC-Rio em 2018.

Ficha Catalográfica

Oliveira, Douglas Pinto de

Implementação de um código numérico tridimensional para simulação de processos de fraturamento em rochas / Douglas Pinto de Oliveira ; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr. ; coorientador: Luis Arnaldo Mejía Camones. – 2020.
70 f. : il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)—Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, 2020.
Inclui bibliografia

1. Engenharia Civil e Ambiental - Teses. 2. Método dos elementos finitos. 3. Método dos elementos discretos. 4. Fraturamento e fragmentação. 5. Código numérico. 6. Geomateriais. I. Vargas Júnior, Eurípedes A. II. Mejía Camones, Luis Arnaldo. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil e Ambiental. IV. Título.

CDD: 624

Agradecimentos

Agradeço à minha família por sempre acreditar em mim.

Agradeço ao professor Vargas pela orientação, ensinamentos e incentivo durante todo o desenvolvimento do trabalho.

Agradeço ao Luis Arnaldo pela ajuda durante o desenvolvimento do trabalho.

Agradeço à professora Raquel pelas sugestões que contribuíram para o enriquecimento do trabalho.

Agradeço à minha amiga Lohana pelo apoio nos momentos difíceis que ocorreram durante o período do mestrado.

Agradeço aos amigos que tive o prazer de fazer durante o período em que frequentei a PUC-Rio e cuja amizade irei levar para o resto da vida: Beatriz, Cristina, Gabriela, Jéssica, Marcela, Pedro, Rafaella e Rômulo.

Agradeço aos professores Júlio César e Leandro Vaz, que foram meus professores na graduação e que me incentivaram a me aventurar nesse novo desafio.

Agradeço a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para a elaboração deste trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Resumo

Oliveira, Douglas Pinto de; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral; Camones, Luis Arnaldo Mejía. **Implementação de um código numérico tridimensional para simulação de processos de fraturamento em rochas**. Rio de Janeiro, 2020. 70p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Este trabalho tem como objetivo apresentar detalhes do desenvolvimento de um código numérico tridimensional para simulação de processos de fraturamento e fragmentação em geomateriais. O código se baseia no método combinado dos elementos finitos e discretos, sendo capaz de simular a transição do contínuo para o descontínuo. A princípio é apresentada uma breve introdução ao método combinado dos elementos finitos e discretos, e as suas principais implementações são destacadas. Além disso, são apresentados os conceitos básicos dos modelos de zona coesiva, ressaltando o modelo baseado em potencial PPR (Park-Paulino-Roesler). Em seguida, são apresentados os detalhes do desenvolvimento do código. O desenvolvimento do código foi dividido em quatro partes: modelagem do contínuo, transição entre o contínuo e o descontínuo, detecção e interação entre contatos e a resolução das equações de equilíbrio. As implementações feitas no código são verificadas mediante a simulação de três tipos de ensaios de laboratório comumente empregados na mecânica das rochas (ensaio brasileiro, ensaio de compressão simples e ensaio de tenacidade à fratura), cujos parâmetros utilizados e os resultados para comparação foram obtidos da literatura. Por fim, são apresentados os resultados exibindo os padrões de fraturamento para cada tipo de ensaio e suas curvas força-deslocamento, ou tensão-deformação, bem como as considerações finais e sugestões para trabalhos futuros.

Palavras-chave

Método dos elementos finitos; método dos elementos discretos; fraturamento e fragmentação; código numérico; geomateriais.

Abstract

Oliveira, Douglas Pinto de; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral (Advisor); Camones, Luis Arnaldo Mejía (Co-advisor). **Implementation of a three-dimensional numerical code for simulating fracturing processes in rocks.** Rio de Janeiro, 2020. 70p. MSc Dissertation – Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This work aims to detail the development of a three-dimensional numerical code for simulating fracturing and fragmentation processes in geomaterials. The code is based on the combined finite-discrete element method, being able to simulate the transition from continuum to discontinuum. At first, a brief introduction to the combined finite-discrete element method is presented, and its main implementations are highlighted. In addition, the basic concepts of the cohesive zone models are shown, emphasizing the PPR (Park-Paulino-Roesler) potential based cohesive model. Then, the details of the code development are presented. The development of the code was divided into four parts: modelling of the continuum, transition from continuum to discontinuum, detection and interaction between contacts, and the solution of the equilibrium equations. The implementations made on the code are verified upon the simulation of three types of laboratory tests commonly employed in rock mechanics (Brazilian test, uniaxial compressive strength test, fracture toughness test), in which the parameters used and the results for comparison were obtained from the literature. At last, the results exhibiting the fracture patterns for each type of test and its force-displacement, or stress-strain, curves are displayed, as well as the final considerations and suggestions for future works.

Keywords

Finite element method; discrete element method; fracturing and fragmentation; numerical code; geomaterials.

Sumário

1	Introdução	13
1.1.	Objetivo	13
1.2.	Organização da Dissertação	14
2	Métodos numéricos na modelagem geomecânica de rochas fraturadas	15
2.1.	Implementações do método combinado dos elementos finitos e discretos	17
2.1.1.	Programa computacional ELFEN	17
2.1.2.	Y-code	19
3	Modelos de zona coesiva	23
3.1.	Modelo baseado em potencial PPR (Park-Paulino-Roesler)	25
4	Desenvolvimento do código	29
4.1.	Modelagem do contínuo	31
4.2.	Transição do contínuo para o descontínuo	33
4.3.	Detecção e interação de contatos	36
4.3.1.	Detecção de contatos	36
4.3.2.	Interação de contatos	39
4.4.	Resolução das equações de equilíbrio	43
5	Verificação do código	47
5.1.	Queda de bloco	48
5.2.	Ensaio brasileiro - Calcário	49
5.3.	Ensaio brasileiro - Gesso	52
5.4.	Ensaio de compressão simples - Calcário	55
5.5.	Ensaio de compressão simples - Gesso	57

5.6. Ensaio de tenacidade à fratura	59
6 Conclusões	64
6.1. Sugestões para trabalhos futuros	65
Referências Bibliográficas	66

Lista de figuras

Figura 1: (a) Direção da ruptura nodal (b) Inserção intra-elemento (c) Inserção inter-elemento (Klerck, 2000).	19
Figura 2: Tipos de elementos finitos e coesivos (a) elementos finitos (b) elementos coesivos (Adaptado de Lisjak et al., 2018).	20
Figura 3: Curva tensão-deslocamento (Guo, 2014).	21
Figura 4: Esquemas do modelo de zona coesiva (Adaptado de Park, 2009).	24
Figura 5: Comparação entre os modelos intrínseco (a) e extrínseco (b) (Paulino et al., 2008).	25
Figura 6: Condições de contorno para o potencial PPR (Park, Paulino e Roesler, 2009).	27
Figura 7: Fluxograma do código desenvolvido.	30
Figura 8: Elemento finito do tipo tetraedro de quatro nós.	31
Figura 9: Exemplificação do processo de inserção dos elementos coesivos (Adaptado de Camones, 2015).	34
Figura 10: (a) Elemento coesivo em sua configuração inicial com espessura zero (b) Elemento coesivo na configuração deformada retratando os vetores normal e tangencial no plano médio (Spring e Paulino, 2014).	36
Figura 11: Definição das direções das separações (Spring e Paulino, 2014).	36
Figura 12: Decomposição do espaço (Adaptado de Munjiza, 2004).	37
Figura 13: Célula central e células vizinhas (Munjiza, 2004).	38
Figura 14: Elementos finitos em contato.	40
Figura 15: Subdivisão do tetraedro em quatro subtetraedros (Smoljanović et al., 2018).	40
Figura 16: Interseção do subtetraedro do <i>target</i> com o plano da base do subtetraedro do <i>contactor</i> (Smoljanović et al., 2018).	41

Figura 17: Interseção do subtetraedro do <i>target</i> com a base do subtetraedro do <i>contactor</i> (Smoljanović et al., 2018).	41
Figura 18: Polígono B (a) integração da força de contato (b) forças de contato normal e tangencial (Smoljanović et al., 2018).	42
Figura 19: Detalhes do modelo da simulação de queda de bloco	48
Figura 20: Bloco fragmentado após a queda	49
Figura 21: Detalhes do modelo de calcário para o ensaio brasileiro.	50
Figura 22: Curvas tensão de tração indireta-deslocamento do ensaio brasileiro do modelo de calcário.	51
Figura 23: Padrão de fraturamento do ensaio brasileiro do modelo de calcário: a) vista 1 b) vista 2.	51
Figura 24: Corpos de prova de diferentes tipos de rocha após a realização de ensaios brasileiro (Guo, Aziz e Schmidt, 1993)	52
Figura 25: Detalhes do modelo de gesso para o ensaio brasileiro.	53
Figura 26: Curvas tensão de tração indireta-deslocamento do ensaio brasileiro do modelo de gesso.	54
Figura 27: Padrão de fraturamento do ensaio brasileiro do modelo de gesso: a) vista 1 b) vista 2.	54
Figura 28: Detalhes do modelo de calcário para o ensaio de compressão simples.	55
Figura 29: Curva tensão axial-deformação axial do ensaio de compressão simples do modelo de calcário.	56
Figura 30: Padrão de fraturamento do ensaio de compressão simples do modelo de calcário: a) vista 1 b) vista 2.	56
Figura 31: Comparação entre o padrão de fraturamento obtido da simulação numérica e experimental: a) simulação numérica, b) experimental (Fukuda et al, 2019).	57
Figura 32: Detalhes do modelo de gesso para o ensaio de compressão simples.	58
Figura 33: Curva tensão axial-deformação axial do ensaio de compressão simples do modelo de gesso.	58
Figura 34: Padrão de fraturamento do ensaio de compressão simples do modelo de gesso: a) vista 1 b) vista 2.	59

Figura 35: Detalhes do corpo de prova para o ensaio CCNBD (Fowell, 1995).	60
Figura 36: Detalhes do modelo para o ensaio de tenacidade à fratura CCNBD.	61
Figura 37: Detalhes do entalhe do modelo para o ensaio CCNBD.	61
Figura 38: Curva força-deslocamento do ensaio de tenacidade à fratura CCNBD.	62
Figura 39: Processo de fraturamento do ensaio CCNBD.	63

Do, or do not. There is no try.

Master Yoda in Star Wars: The Empire Strikes Back

1 Introdução

A compreensão dos processos de fraturamento e fragmentação de materiais possui grande importância em diversas áreas da engenharia. Análises numéricas precisas da iniciação e propagação de fraturas servem de auxílio no entendimento de fenômenos mecânicos observados em experimentos de laboratório e em campo, além de ajudar na elaboração de projetos de engenharia e na avaliação de riscos. Em alguns problemas de engenharia as fraturas devem ser evitadas com o intuito de se garantir a segurança e durabilidade, por exemplo, prédios residenciais e componentes aeronáuticos. Em outros, as fraturas são necessárias do ponto de vista de produção, por exemplo, desmonte a fogo, cominuição na mineração e produção de óleo em campos.

Na engenharia de rochas, onde a iniciação e a propagação de fraturas podem ser consideradas como mecanismos chave para a instabilidade de maciços rochosos, o emprego da modelagem numérica visando simular os processos de fraturamento e fragmentação possuem aplicações em diversos problemas, por exemplo, avaliação de estabilidade de minas a céu aberto e taludes rochosos naturais, estabilidade de escavações subterrâneas, fraturamento ocasionado por desmonte a fogo, fraturamento hidráulico, estabilidade de poços de petróleo, dentre outros. Assim sendo, o desenvolvimento e aprimoramento de códigos numéricos com esse intuito vem se tornando cada vez mais objeto de pesquisas.

1.1. Objetivo

O presente trabalho tem por objetivo apresentar detalhes do desenvolvimento de um código numérico tridimensional baseado no método combinado dos elementos finitos e discretos que seja capaz de reproduzir processos de fraturamento e fragmentação em geomateriais.

1.2. Organização da Dissertação

A presente dissertação foi organizada em seis capítulos da seguinte forma:

- O Capítulo 2 apresenta uma breve revisão sobre os métodos numéricos utilizados na modelagem geomecânica de rochas fraturadas, juntamente com uma introdução ao método combinado dos elementos finitos e discretos e algumas das suas principais implementações;
- O Capítulo 3 apresenta os aspectos fundamentais dos modelos de zona coesiva e descreve o modelo de zona coesiva baseado em potencial PPR (Park-Paulino-Roesler);
- O Capítulo 4 apresenta detalhes das técnicas utilizadas no desenvolvimento do código numérico;
- O Capítulo 5 apresenta as verificações realizadas para avaliar a funcionalidade do código numérico desenvolvido;
- O Capítulo 6 apresenta as conclusões do trabalho realizado e as sugestões para trabalhos futuros.

2

Métodos numéricos na modelagem geomecânica de rochas fraturadas

Os métodos numéricos empregados na modelagem geomecânica de rochas fraturadas são geralmente classificados em contínuos, descontínuos e híbridos (contínuo/descontínuo) (Jing, 2003). De acordo com Jing (2003), uma diferença importante entre os métodos contínuos e os métodos descontínuos está no modo como é tratada a compatibilidade dos deslocamentos. No caso dos métodos contínuos, é necessário que haja compatibilidade de deslocamentos entre elementos. Já no caso dos métodos descontínuos, não é necessário que haja compatibilidade de deslocamentos entre os elementos, sendo essa compatibilidade substituída por condições de contato entre elementos.

A principal premissa dos métodos baseados na modelagem contínua é que o domínio computacional é tratado como um único corpo contínuo (Lisjak e Grasseli, 2014). Dentre os métodos baseados nessa abordagem estão o método dos elementos finitos (FEM), o método das diferenças finitas (FDM) e o método dos elementos de contorno (BEM). Segundo Mahabadi et al. (2012), todos esses métodos já foram aplicados com sucesso na avaliação do comportamento global de maciços rochosos e na análise de tensão e deformação. Contudo, a representação explícita das fraturas e o seu crescimento não são simples nesses métodos, sobretudo devido a sua premissa contínua (Mahabadi et al., 2012).

Visando superar limitações provenientes dos métodos baseados na abordagem contínua, Cundall (1971) propôs o método dos elementos discretos (DEM), método baseado em uma abordagem descontínua. As técnicas de modelagem descontínuas tratam o material como um conjunto de blocos ou partículas separados que podem interagir com outros blocos e partículas que estão no seu entorno, sendo assim, a detecção dos contatos e a interação entre elementos são dois aspectos importantes da formulação do método dos elementos discretos (Lisjak e Grasseli, 2014; Guo, 2014). De acordo com Jing (2003), o DEM tem sido amplamente empregado na investigação do processo de fraturamento e

fragmentação em rochas. No entanto, o DEM apresenta certos problemas em se tratando da deformabilidade e fraturamento dos elementos discretos, sendo a iniciação e o crescimento da fratura geralmente não modelados de forma direta, mas sim de maneira implícita por meio da atribuição de modelos constitutivos elastoplásticos aos blocos de rocha (Mahabadi et al., 2012). A simulação explícita do processo de fraturamento e fragmentação de rochas pode ser modelada utilizando diagramas de Voronoi (Lorig e Cundall, 1989) ou por meio da utilização do modelo de partículas cimentadas BPM (bonded particle model) (Potyondy e Cundall, 2004).

Foi pensando nas vantagens apresentadas pelo método dos elementos finitos, e pelo método dos elementos discretos, que Munjiza, Owen e Bicanic (1995) propuseram o método combinado dos elementos finitos e discretos (FEMDEM). Nesse método todo o domínio é tratado como um sistema multicorpo onde cada elemento discreto é discretizado por uma malha de elementos finitos (Guo, 2014). O comportamento contínuo, analisado pelo FEM, está relacionado com as deformações e tensões dentro dos elementos discretos, enquanto que o comportamento descontínuo, analisado pelo DEM, está relacionado com o contato e interação entre interfaces descontínuas, por exemplo, as superfícies das fraturas. De acordo com Guo (2014), a habilidade de tal método em lidar tanto com problemas contínuos, quanto com problemas descontínuos, faz com que o seu uso seja ideal para simular a transição do contínuo para o descontínuo, como a simulação do processo de fraturamento e fragmentação de sólidos.

A sequência de eventos presentes no método FEMDEM pode ser expressa da seguinte forma: a simulação se inicia com um único ou uma coleção de elementos discretos que são discretizados em malhas de elementos finitos, com o prosseguimento da simulação, esses corpos podem se deformar, rotacionar, transladar, interagir uns com os outros e se fraturar, mediante a satisfação de algum critério de ruptura, produzindo assim novos elementos discretos, sendo esse processo continuado até que o sistema chegue ao equilíbrio, ou até certo tempo de interesse (Munjiza, Owen e Bicanic, 1995; Tatone e Grasselli, 2015).

Nas últimas décadas, diversas implementações do método combinado dos elementos finitos e discretos foram realizadas, cada uma com a sua peculiaridade. Na próxima seção serão apresentadas algumas implementações do FEMDEM e seus princípios fundamentais.

2.1. Implementações do método combinado dos elementos finitos e discretos

2.1.1. Programa computacional ELFEN

ELFEN é um software comercial de elementos finitos e elementos discretos desenvolvido pela Rockfield Software Ltd. Dentre as suas características está a capacidade de resolver problemas multifísicos, multiescala e altamente não lineares para os domínios contínuo e descontínuo. No que diz respeito ao processo de fraturamento e fragmentação de sólidos, o ELFEN apresenta modelos constitutivos para iniciação da fratura baseados em dano e na mecânica da fratura.

A formulação contínua do ELFEN é baseada no método explícito dos elementos finitos (Klerck, Sellers e Owen, 2004). O amolecimento (ou endurecimento) do material é capturado utilizando o modelo elastoplástico de Mohr-Coulomb com fluxo não associado com parâmetros de resistência ao cisalhamento, incluindo coesão, ângulo de atrito e dilatância, definidos em função da deformação plástica efetiva (Lisjak e Grasselli, 2014).

A simulação do fraturamento, dano e amolecimento associado é alcançada empregando uma abordagem baseada na energia da fratura controlada por certo critério de ruptura (Vyazmensky, 2008). Os dois principais modelos constitutivos para as fraturas implementados no ELFEN são o modelo de banda de fissuramento com rotação e o modelo de Mohr-Coulomb com um cut-off de Rankine. Dentre eles o critério de ruptura de Mohr-Coulomb com um cut-off de Rankine é tido como o mais sofisticado, sendo capaz de considerar a ruptura do material tanto por tração quanto por compressão (Vyazmensky, 2008).

Uma questão importante relacionada a modelagem de fraturas é como transformar a malha contínua de elementos finitos em um meio descontínuo fraturado. Essa questão é resolvida com o emprego de um esquema de fratura nodal compreendendo três estágios: (1) criação de um mapa de ruptura para todo o domínio, definindo um fator de ruptura dado pela razão entre a deformação inelástica e a deformação crítica (Equação (1) e Equação (2)); (2) identificação da direção das fraturas em relação a magnitude do fator de ruptura; e (3) inserção das

fraturas discretas e atualização da topologia da malha (remalhamento) (Klerck, Sellers e Owen, 2004; Mohammadnejad et al., 2018).

$$\varepsilon_c^f = \frac{2G_f}{h_c f_t} \quad (1)$$

$$F_k = (\varepsilon^f / \varepsilon_c^f)_k \quad (2)$$

onde G_f é a energia da fratura, h_c é a dimensão do elemento, f_t é a resistência à tração, ε_c^f é a deformação crítica (deformação máxima admissível pelo material antes de se fraturar), ε^f é a deformação inelástica e F_k é o fator de ruptura local no ponto de Gauss k .

O fator de ruptura local F_k está relacionado com uma direção de fratura local θ_k , que é normal a direção da ruptura local (amolecimento). Como a inserção de fraturas discretas se torna mais simples se associada a fatores de ruptura nodais, procede-se a realização do cálculo do fator de ruptura nodal por meio da média ponderada dos fatores de ruptura dos elementos adjacentes, juntamente com o cálculo da direção da fratura nodal, dados por:

$$\bar{F}_p = \frac{\sum_{k=1}^{N_{adj}} F_k w_k}{\sum_{k=1}^{N_{adj}} w_k} \quad (3)$$

$$\bar{\theta}_p = \frac{\sum_{k=1}^{N_{adj}} \theta_k w_k}{\sum_{k=1}^{N_{adj}} w_k} \quad (4)$$

onde N_{adj} é o número de elementos adjacentes e w_k é o fator de ponderação, geralmente tomado como o volume do elemento.

Segundo Klerck (2000), uma fratura discreta será necessariamente realizada através de um nó se o fator de ruptura nodal for maior do que a unidade, podendo esta ser inserida de dois modos diferentes (Figura 1): intra-elemento ou inter-elemento. A inserção intra-elemento cria uma fratura na direção de sua propagação mediante a divisão dos elementos finitos, já a inserção inter-elemento cria uma fratura na aresta do elemento finito com orientação mais favorável em relação ao plano de ruptura. Após o procedimento de inserção das fraturas ocorre o processo de detecção e interação dos contatos entre regiões contínuas, e/ou as partes discretas

resultantes, com a utilização do método da penalidade ou do método dos multiplicadores de Lagrange.

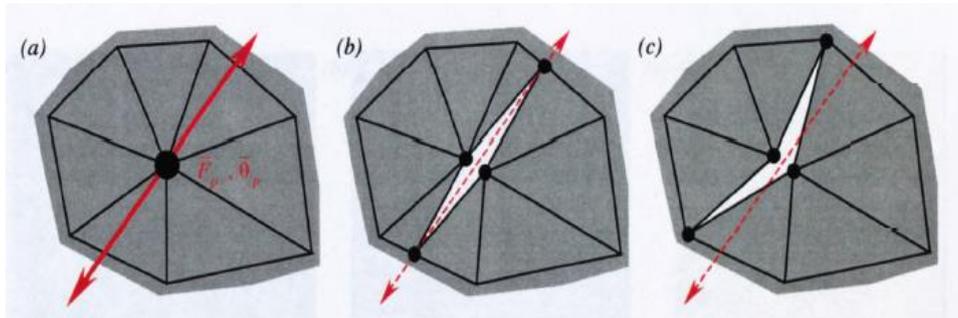


Figura 1: (a) Direção da ruptura nodal (b) Inserção intra-elemento (c) Inserção inter-elemento (Klerck, 2000).

2.1.2. Y-code

O Y-code pode ser considerado como a implementação mais comum do método combinado dos elementos finitos e discretos, sendo amplamente empregado em problemas geomecânicos (Mohammadnejad et al., 2018). O código foi originalmente desenvolvido por Munjiza (2004) como um código aberto, tendo sido utilizado como base para diversas implementações relacionadas com o FEMDEM. No Y-code os modelos são discretizados utilizando elementos triangulares de três nós, no caso 2D, e tetraedros de quatro nós, no caso 3D, com elementos coesivos inseridos nas interfaces entre elementos finitos, sendo elementos coesivos de quatro nós, no caso 2D, e elementos de seis nós, no caso 3D (Figura 2), sendo o comportamento do material analisado por meio de um modelo constitutivo elástico isotrópico. Esse código muito se assemelha ao DEM, em particular ao modelo BPM, onde os corpos rígidos são substituídos por elementos deformáveis (Mohammadnejad et al., 2018). Os elementos coesivos são criados e inseridos entre pares de elementos triangulares/tetraedros antes da simulação ter início e nenhum processo de remalhamento é realizado durante a simulação (Lei, Latham e Tsang, 2017). Esse tipo de modelagem, onde os elementos coesivos são inseridos antes da simulação, é conhecida como modelagem do tipo intrínseca.

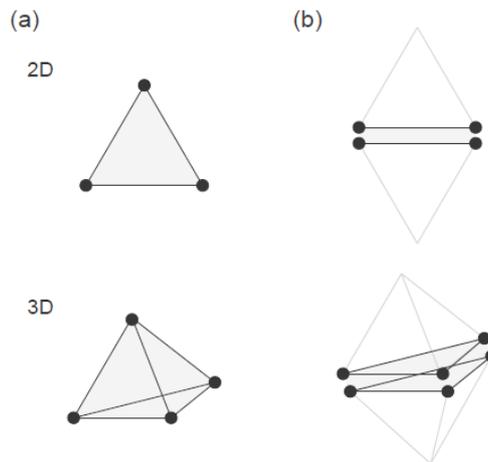


Figura 2: Tipos de elementos finitos e coesivos (a) elementos finitos (b) elementos coesivos (Adaptado de Lisjak et al., 2018).

O início do processo de fraturamento, e o seu desenvolvimento, ocorrem mediante a separação das paredes dos elementos coesivos (abertura e/ou deslizamento). Caso não haja nenhuma separação ($\delta = \delta_p = 0$), a tensão coesiva a qual as paredes do elemento coesivo estão submetidas equivale a resistência à tração (f_t) ou a resistência ao cisalhamento (f_s) (Figura 3) (Mohammadnejad et al., 2018). Com o aumento da separação ($\delta > \delta_p$) a tensão coesiva diminui até chegar a zero quando $\delta = \delta_c$. A partir desse momento o elemento coesivo deixa de ter influência no modelo e a fratura pode se propagar. As tensões coesivas nos elementos são calculadas por meio das Equações 5 e 6:

$$\sigma = \begin{cases} \left[2 \frac{\delta_o}{\delta_{op}} - \left(\frac{\delta_o}{\delta_{op}} \right)^2 \right] f_t, & \text{se } 0 \leq \delta_o \leq \delta_{op}; \\ f_t z, & \text{se } \delta_o > \delta_{op}; \\ 2 \frac{\delta_o}{\delta_{op}} f_t, & \text{se } \delta_o < 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\tau = \begin{cases} \left[2 \frac{\delta_s}{\delta_{sp}} - \left(\frac{\delta_s}{\delta_{sp}} \right)^2 \right] f_s, & \text{se } 0 \leq \delta_s \leq \delta_{sp}; \\ f_s z, & \text{se } \delta_s > \delta_{sp} \end{cases} \quad (6)$$

onde σ é a tensão normal, τ é a tensão cisalhante, f_t é a resistência à tração, f_s é a resistência ao cisalhamento, os subscritos contendo “o” referem-se a abertura,

os subscritos contendo “s” referem-se ao deslizamento e z é um parâmetro heurístico de amolecimento dado por:

$$z = \left[1 - \frac{a + b - 1}{a + b} e^{D(a + cb/((a + b)(1 - a - b)))} \right] [a(1 - D) + b(1 - D)^c] \quad (7)$$

onde a , b e c são parâmetros obtidos por ajuste de curva de curvas tensão-deslocamento experimentais e D é expresso por:

$$D = \text{mínimo} \left(1, \sqrt{\left(\frac{\delta_o - \delta_{op}}{\delta_{oc} - \delta_{op}} \right)^2 + \left(\frac{\delta_s - \delta_{sp}}{\delta_{sc} - \delta_{sp}} \right)^2} \right) \quad (8)$$

sendo δ_{oc} e δ_{sc} funções da resistência à tração (f_t) e energia da fratura no modo I (G_{II}) e da resistência ao cisalhamento (f_s) e energia da fratura no modo II (G_{III}), respectivamente.

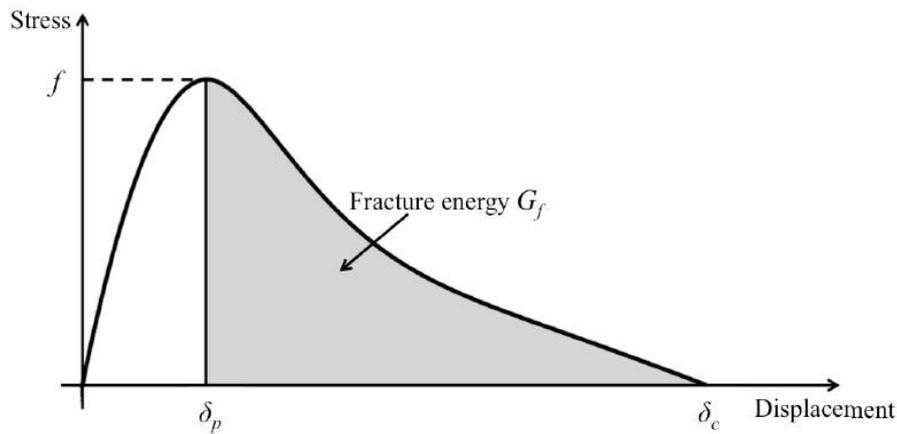


Figura 3: Curva tensão-deslocamento (Guo, 2014).

O processo de detecção de contatos é realizado por um algoritmo denominado NBS (No Binary Search) (Munjiza e Andrews, 1998; Munjiza, 2004) e o processo de interação entre contatos é realizado pelo método da penalidade (Munjiza e Andrews, 2000).

Devido ao Y-code apresentar certas limitações quando empregado em problemas da mecânica das rochas, alguns códigos derivados do código original foram desenvolvidos, como o Y-geo, código desenvolvido pela Universidade de

Toronto (Mahabadi et al., 2012). O Y-geo foi desenvolvido baseado na versão 2D do Y-code. Dentre as principais mudanças realizadas estão:

- 1) Implementação de uma lei de atrito quase estático, já que a maioria dos problemas de engenharia das rochas lidam com problemas quase-estáticos;
- 2) Utilização do critério de ruptura de Mohr-Coulomb, já que o Y-code original considera a resistência ao cisalhamento como uma constante do material, desprezando a influência da tensão normal;
- 3) Implementação de um critério de resistência ao cisalhamento para as descontinuidades;
- 4) Introdução de um modelo para dissipação de energia devido ao impacto, já que no código original o modelo de interação entre contatos disponível é baseado na conservação da energia, não sendo apto a lidar com processos altamente dissipativos, como ocorre durante problemas como queda de blocos.

O Y-geo foi posteriormente aperfeiçoado dando origem ao software comercial Irazu (Mahabadi et al., 2016).

Outro código derivado do Y-code que vale ser destacado é o VGeST (Virtual Geoscience Simulation Tools), desenvolvido pelo Applied Modelling and Computation Group (AMCG) da Imperial College London. O mesmo foi recentemente atualizado e renomeado como Solidity. Dentre os melhoramentos realizados no código estão a implementação de modelos constitutivos elastoplásticos (Karantzoulis, 2017), acoplamento térmico (Joulin et al., 2017), a paralelização do código e um algoritmo de detecção de contatos mais veloz (Xiang, Latham e Farsi, 2017).

3 Modelos de zona coesiva

A utilização de modelos de zona coesiva (Dugdale, 1960; Barenblatt, 1962; Hillerborg, Modéer e Petersson, 1976) tem se tornado um procedimento comum na simulação do processo de fraturamento de materiais quase-frágeis. O modelo de zona coesiva representa uma zona de dano que se desenvolve próxima a ponta da fratura, assumindo que toda a resposta inelástica do material possa ser agrupada em uma superfície a frente da mesma. (Camanho, Turon e Costa, 2008). O ponto de vista a partir do qual esses modelos se originam considera a fratura como um fenômeno gradual no qual a separação das suas paredes ocorre através de uma zona coesiva e é resistida por tensões coesivas (Ortiz e Pandolfi, 1999). Portanto, os elementos coesivos utilizados não representam nenhum material físico e apenas descrevem as forças coesivas que ocorrem quando os elementos materiais estão sendo separados (Kregting, 2005).

De acordo com Park (2009), o processo de fraturamento do modelo de zona coesiva consiste, geralmente, de quatro estágios (Figura 4). O primeiro estágio (Estágio I) representa o comportamento contínuo do material sem fraturas. O segundo estágio (Estágio II) representa a iniciação da fratura, que ocorre quando certo critério é atendido. O terceiro estágio (Estágio III) descreve a evolução da ruptura, a qual é governada por uma relação coesiva não linear, ou curva de amolecimento, isto é, a relação entre as tensões coesivas (T_n , T_t) e a separação (Δ_n , Δ_t) através da superfície da fratura. O quarto e último estágio (Estágio IV) define a ruptura quando a separação da fratura chega ao seu valor final (δ_n). O Estágio IV representa a nova superfície criada pelo processo de fraturamento na qual a tensão coesiva é igual a zero.

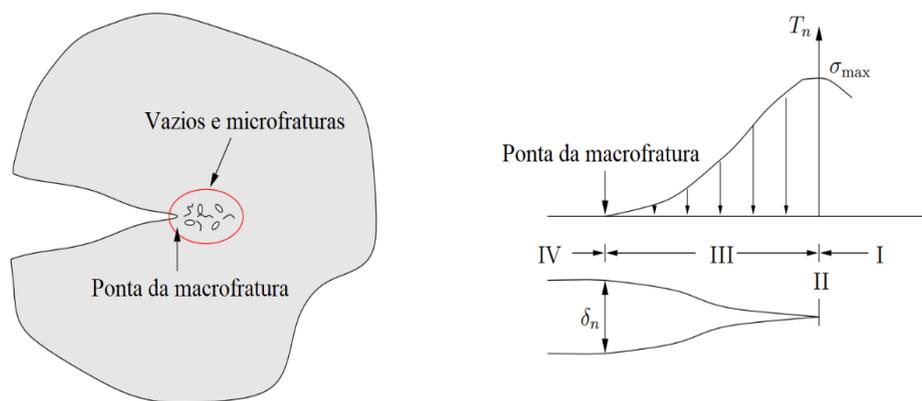


Figura 4: Esquemas do modelo de zona coesiva (Adaptado de Park, 2009).

É importante destacar que o modelo de zona coesiva não se limita a modelar apenas a ponta de uma única fratura, mas também é capaz de descrever a nucleação de fraturas e fraturas generalizadas (Park e Paulino, 2011).

Os modelos de zona coesiva podem ser divididos em intrínseco e extrínseco, sendo a presença de uma curva inicial elástica a principal diferença entre esses dois tipos de modelos (Figura 5) (Paulino et al., 2008). No modelo intrínseco a tensão coesiva aumenta com a separação até atingir um valor máximo e então começa a diminuir até chegar a zero, quando a separação final é alcançada. Já no caso do modelo extrínseco a separação só tem início quando a tensão interfacial atinge a resistência do material e então a mesma começa a diminuir com o aumento da separação, até chegar a zero. Nas simulações utilizando o modelo intrínseco os elementos coesivos são inseridos na malha de elementos finitos antes do início da simulação, já no caso do modelo extrínseco os elementos coesivos são inseridos na malha de maneira adaptativa sempre que necessário.

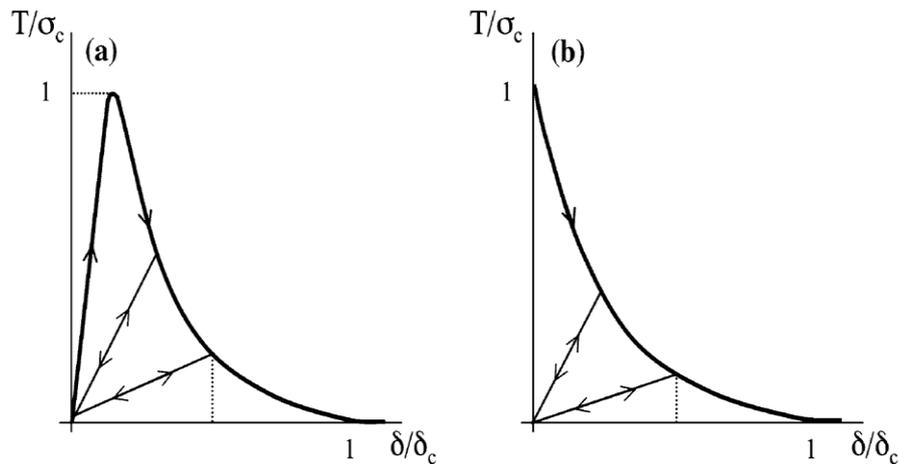


Figura 5: Comparação entre os modelos intrínseco (a) e extrínseco (b) (Paulino et al., 2008).

No modelo de zona coesiva, a questão fundamental para simulação dos mecanismos de ruptura é a caracterização das interações coesivas entre as superfícies da fratura (Park, Paulino e Roesler, 2009). As relações constitutivas coesivas podem ser classificadas como modelos não baseados em potencial e modelos baseados em potencial (Park e Paulino, 2011). Segundo Park e Paulino (2011), as relações constitutivas coesivas exibem, de maneira geral, certas características como:

- A relação tensão coesiva separação é independente de qualquer movimento de corpo rígido sobreposto.
- O trabalho necessário para criar uma nova superfície é finito e o seu valor corresponde a energia da fratura, isto é, a área sob a curva de amolecimento.
- A energia da fratura do modo I é geralmente diferente da energia da fratura do modo II.
- Existe um valor de separação final a partir do qual a ruptura é considerada completa.
- A tensão coesiva na superfície da fratura diminui de acordo com o aumento da separação sob a condição de amolecimento.

3.1. Modelo baseado em potencial PPR (Park-Paulino-Roesler)

O modelo baseado em potencial PPR (Park, Paulino e Roesler, 2009) é um modelo de modo misto de ruptura proposto para descrever a fratura macroscópica.

O comportamento macroscópico é representado pelas seguintes condições de contorno (Figura 6) (Park, Paulino e Roesler, 2009):

- A ruptura normal se dá ($T_n = 0$) quando a separação normal atinge a separação normal final (δ_n) ou a separação tangencial atinge a separação tangencial final conjugada ($\bar{\delta}_t$),

$$T_n(\delta_n, \Delta_t) = 0, T_n(\Delta_n, \bar{\delta}_t) = 0 \quad (9)$$

- De forma semelhante, a ruptura tangencial ocorre ($T_t = 0$) quando a separação normal atinge a separação normal final conjugada ($\bar{\delta}_n$) ou a separação tangencial atinge a separação tangencial final (δ_t),

$$T_t(\delta_t, \Delta_n) = 0, T_t(\Delta_t, \bar{\delta}_n) = 0 \quad (10)$$

- As áreas sob as interações coesivas correspondem as energias da fratura,

$$\phi_n = \int_0^{\delta_n} T_n(\Delta_n, 0) d\Delta_n, \phi_t = \int_0^{\delta_t} T_t(0, \Delta_t) d\Delta_t \quad (11)$$

- As tensões coesivas máximas correspondem as resistências coesivas (σ_{\max} , τ_{\max}),

$$T_n(\delta_{nc}, 0) = \sigma_{\max}, T_t(0, \delta_{tc}) = \tau_{\max} \quad (12)$$

- O comportamento de amolecimento do material, por exemplo, frágil, quase-frágil ou *plateau*, é caracterizado por dois parâmetros de forma (α , β).

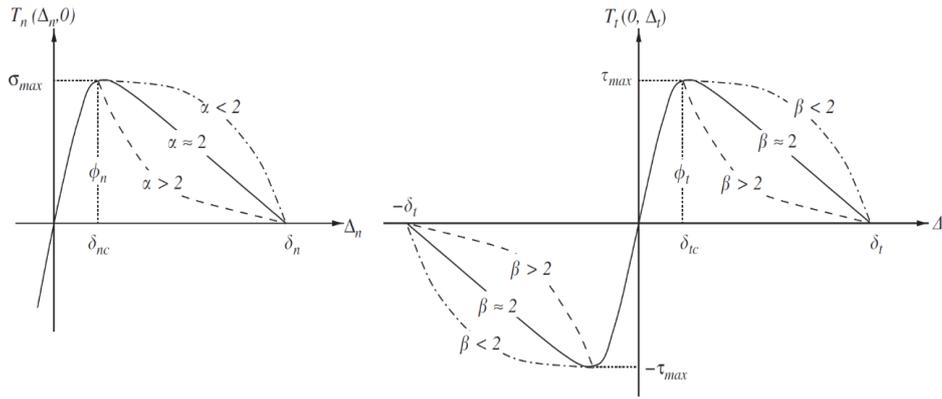


Figura 6: Condições de contorno para o potencial PPR (Park, Paulino e Roesler, 2009).

Tanto o modelo intrínseco como o modelo extrínseco podem ser derivados do potencial PPR. Aqui será apresentada a formulação do modelo extrínseco, modelo esse utilizado no código desenvolvido. Para informações sobre a formulação do modelo intrínseco o leitor pode recorrer aos trabalhos de Park, Paulino e Roesler (2009) e de Park e Paulino (2011).

A função potencial para o modelo de zona coesiva extrínseco é expressa como:

$$\Psi(\Delta_n, \Delta_t) = \min(\phi_n, \phi_t) + \left[\Gamma_n \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^\alpha + \langle \phi_n - \phi_t \rangle \right] \left[\Gamma_t \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^\beta + \langle \phi_t - \phi_n \rangle \right] \quad (13)$$

onde $\langle \cdot \rangle$ são os parênteses de Macaulay,

$$\langle x \rangle = \begin{cases} 0, & (x < 0) \\ x, & (x \geq 0) \end{cases} \quad (14)$$

As tensões coesivas normal e tangencial ao longo da superfície da fratura, obtidas do gradiente da função potencial, são:

$$T_n(\Delta_n, \Delta_t) = -\alpha \frac{\Gamma_n}{\delta_n} \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^{\alpha-1} \left[\Gamma_t \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^\beta + \langle \phi_t - \phi_n \rangle \right] \quad (15)$$

$$T_t(\Delta_n, \Delta_t) = -\beta \frac{\Gamma_t}{\delta_t} \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^{\beta-1} \left[\Gamma_n \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^\alpha + \langle \phi_n - \phi_t \rangle \right] \frac{\Delta_t}{|\Delta_t|} \quad (16)$$

As separações finais normal e tangencial (δ_n, δ_t) são expressas como:

$$\delta_n = \alpha \frac{\phi_n}{\sigma_{\max}} \quad (17)$$

$$\delta_t = \beta \frac{\phi_t}{\tau_{\max}} \quad (18)$$

Já as separações finais conjugadas normal e tangencial ($\bar{\delta}_n, \bar{\delta}_t$) são dadas por:

$$\bar{\delta}_n = \delta_n - \delta_n \left(\frac{\langle \phi_n - \phi_t \rangle}{\phi_n} \right)^{1/\alpha} \quad (19)$$

$$\bar{\delta}_t = \delta_t - \delta_t \left(\frac{\langle \phi_t - \phi_n \rangle}{\phi_t} \right)^{1/\beta} \quad (20)$$

As constantes de energia (Γ_n, Γ_t) são obtidas da seguinte forma:

$$\Gamma_n = \begin{cases} (-\phi_n)^{\langle \phi_n - \phi_t \rangle / (\phi_n - \phi_t)}, & (\phi_n \neq \phi_t) \\ -\phi_n, & (\phi_n = \phi_t) \end{cases} \quad (21)$$

$$\Gamma_t = \begin{cases} (-\phi_t)^{\langle \phi_t - \phi_n \rangle / (\phi_t - \phi_n)}, & (\phi_n \neq \phi_t) \\ 1, & (\phi_n = \phi_t) \end{cases} \quad (22)$$

4 Desenvolvimento do código

O código foi desenvolvido utilizando a linguagem de programação C. A Figura 7 apresenta um fluxograma do código desenvolvido. Na etapa de *Leitura dos dados de entrada* o código lê as informações da malha de elementos finitos que será utilizada na modelagem numérica, juntamente com as propriedades dos materiais, parâmetros utilizados na simulação e as condições de contorno. Na etapa de *Inicialização* são inicializadas as massas e as velocidades dos nós do modelo. Na etapa de *Cálculo das forças internas* um loop percorre todos os elementos finitos e são calculadas as forças devidas as deformações de tais elementos. Na etapa de *Cálculo das forças coesivas* um loop percorre todos os elementos coesivos e são calculadas as forças coesivas devido a separação das paredes de tais elementos. Em seguida um loop percorre todas as interfaces entre elementos finitos e é checada a necessidade de inserção de elementos coesivos, mediante um critério de inserção que será apresentado na seção 4.2. Na etapa de *Detecção de contatos* é realizada a busca de contatos entre elementos finitos utilizando um algoritmo que será apresentado na seção 4.3.1. Na etapa de *Cálculo das forças de contato* são realizados os cálculos das forças normais e tangenciais originadas pelos elementos em contato. Na etapa de *Resolução das equações de equilíbrio e atualização das posições dos nós* as equações de equilíbrio são resolvidas utilizando a técnica da Relaxação Dinâmica que será apresentada na seção 4.4 e a posições dos nós são atualizadas. Em seguida é verificada a necessidade de se salvar os resultados. Os resultados são salvos a cada intervalo de tempo previamente determinado. Por fim é verificado se a análise chegou ao fim, isto é, se foi atingida a quantidade máxima de ciclos previamente selecionada. Caso isso não ocorra, um novo ciclo se inicia e as etapas são repetidas.

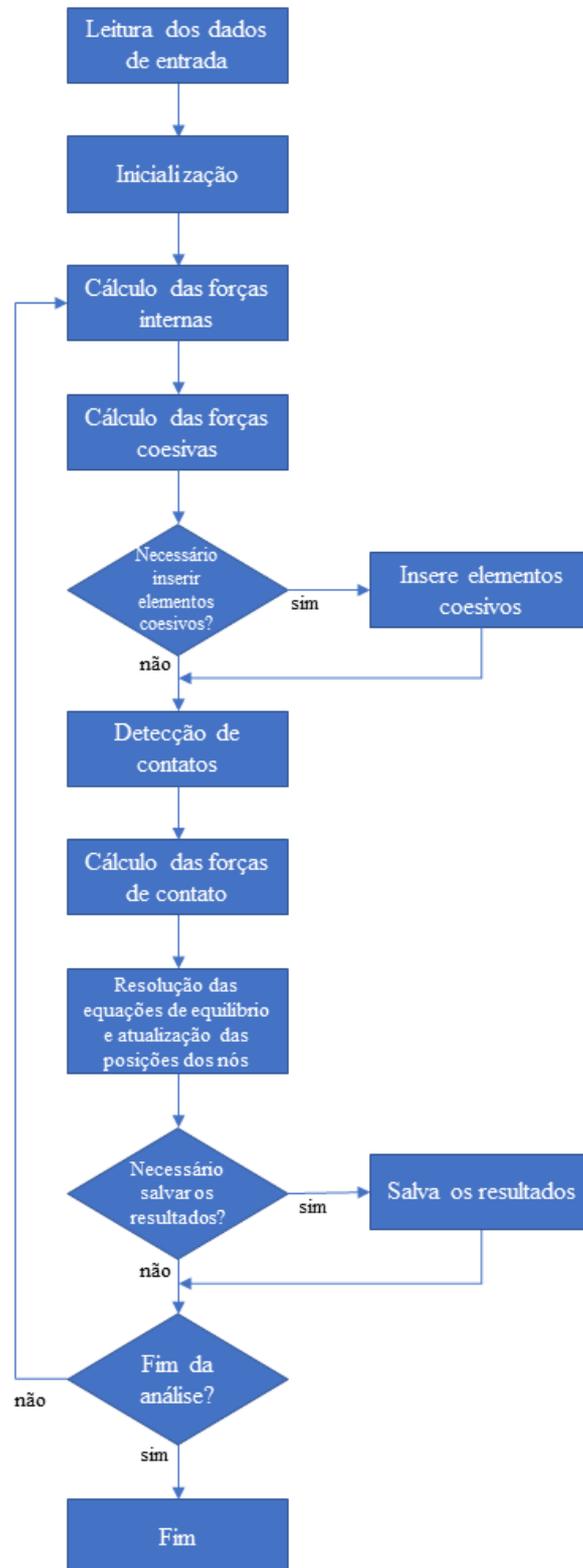


Figura 7: Fluxograma do código desenvolvido.

O desenvolvimento do código foi dividido em quatro partes: modelagem do contínuo, transição do contínuo para o descontínuo, detecção e interação de contatos e resolução das equações de equilíbrio. A versão tridimensional aqui apresentada serve como uma continuação ao trabalho de Camones (2015) no qual uma versão bidimensional do código foi desenvolvida. Nas próximas seções serão apresentados detalhes das técnicas utilizadas em cada parte do código.

4.1. Modelagem do contínuo

A modelagem do contínuo é feita utilizando elementos finitos do tipo tetraedros de quatro nós, também conhecidos como tetraedros de deformação constante (Figura 8).

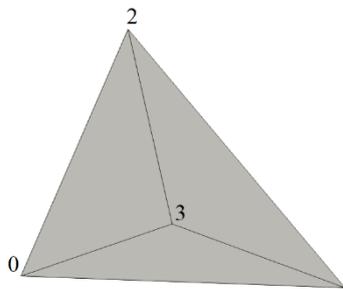


Figura 8: Elemento finito do tipo tetraedro de quatro nós.

As deformações dos elementos finitos são obtidas com a aplicação da teoria das deformações finitas. Segundo Munjiza (2004), no FEMDEM as deformações podem ser pequenas na maioria dos problemas de importância prática, porém os deslocamentos quase nunca são pequenos, o que inviabiliza a utilização do tensor de deformações infinitesimais. Ainda segundo Munjiza (2004), pequenas deformações implicam somente em pequenos alongamentos, enquanto rotações e deslocamentos são grandes.

O gradiente de deformação (\mathbf{F}) é definido como:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} \quad (23)$$

onde \mathbf{x} é a posição do elemento na configuração deformada e \mathbf{X} é a posição do elemento na configuração inicial.

Para elementos do tipo tetraedros de quatro nós o gradiente de deformação pode ser calculado da seguinte forma:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} X_{1c} - X_{0c} & X_{2c} - X_{0c} & X_{3c} - X_{0c} \\ Y_{1c} - Y_{0c} & Y_{2c} - Y_{0c} & Y_{3c} - Y_{0c} \\ Z_{1c} - Z_{0c} & Z_{2c} - Z_{0c} & Z_{3c} - Z_{0c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_{1i} - X_{0i} & X_{2i} - X_{0i} & X_{3i} - X_{0i} \\ Y_{1i} - Y_{0i} & Y_{2i} - Y_{0i} & Y_{3i} - Y_{0i} \\ Z_{1i} - Z_{0i} & Z_{2i} - Z_{0i} & Z_{3i} - Z_{0i} \end{bmatrix}^{-1} \quad (24)$$

onde os subscritos contendo “c” referem-se as coordenadas globais dos nós do elemento deformado e os subscritos contendo “i” referem-se as coordenadas globais dos nós do elemento indeformado.

De posse do gradiente de deformação procede-se ao cálculo do tensor de deformação de Cauchy-Green à esquerda (\mathbf{B}):

$$\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T \quad (25)$$

Do tensor de deformação de Cauchy-Green à esquerda obtêm-se o tensor de deformação de Green-St. Venant (\mathbf{E}):

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} - \mathbf{I}) \quad (26)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade.

As tensões nos elementos são obtidas utilizando o modelo constitutivo neo-Hookeano para material compressível. O modelo neo-Hookeano é uma extensão da lei de Hooke para grandes deformações (Xiang, Munjiza e Latham, 2009). O tensor de Cauchy ($\boldsymbol{\sigma}$) é dado por:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2 \frac{\mu}{J} \mathbf{E} + \frac{\lambda}{J} (\ln J) \mathbf{I} \quad (27)$$

onde J é o determinante do gradiente de deformação e μ e λ são as constantes de Lamé,

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (28)$$

e,

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (29)$$

onde E é o módulo de elasticidade e ν é o coeficiente de Poisson.

As forças internas (\mathbf{f}_{int}) nos nós dos elementos são obtidas calculando os vetores de tensões (\mathbf{t}) em cada face dos elementos e distribuindo esse valor entre os três nós de cada face de forma igualitária:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} * \mathbf{n} \quad (30)$$

$$\mathbf{f}_{\text{int}} = \frac{\mathbf{t}}{3} \quad (31)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal referente a face do elemento.

4.2. Transição do contínuo para o descontínuo

A transição do contínuo para o descontínuo se dá por meio da inserção de elementos coesivos nas interfaces entre elementos finitos. Esses elementos coesivos são inseridos de maneira adaptativa sempre que o critério de inserção é atendido. O critério de inserção leva em consideração a resistência à tração do material f_t , considerada como constante, e a resistência ao cisalhamento f_s definida pelo critério de ruptura de Mohr-Coulomb com um cut-off de tração (Equação (32)). No momento em que a tensão normal na interface entre dois elementos finitos supera o valor da resistência à tração, ou a tensão cisalhante supera a resistência ao cisalhamento, um elemento coesivo é inserido nessa interface.

$$f_s = \begin{cases} c - \sigma_n \tan \phi, & \text{se } \sigma_n < f_t \\ f_t, & \text{se } \sigma_n \geq f_t \end{cases} \quad (32)$$

onde c é a coesão, ϕ é o ângulo de atrito e σ_n é a tensão normal atuando na interface entre elementos finitos. Vale ressaltar que a convenção de sinais aqui utilizada é a convenção da engenharia mecânica, onde tensões de compressão são negativas e tensões de tração são positivas.

A inserção dos elementos coesivos de maneira adaptativa se faz possível mediante o uso de uma estrutura de dados topológica denominada *TopS* (Celes, Paulino e Espinha, 2005a; Celes, Paulino e Espinha, 2005b). A utilização da *TopS* é um dos grandes diferenciais do código desenvolvido, pois possibilita a modelagem do tipo extrínseca, que é quando os elementos coesivos são inseridos de maneira adaptativa após o início da simulação. Essa estrutura, utilizada como uma biblioteca da linguagem C, é responsável por gerenciar a malha de elementos finitos. Quando é necessária a inserção de um elemento coesivo recorre-se a *TopS*, sendo ela responsável por inserir tais elementos nas interfaces entre elementos finitos e por duplicar os nós em comum entre elementos coesivos. A exemplificação do processo de inserção é mostrada na Figura 9.

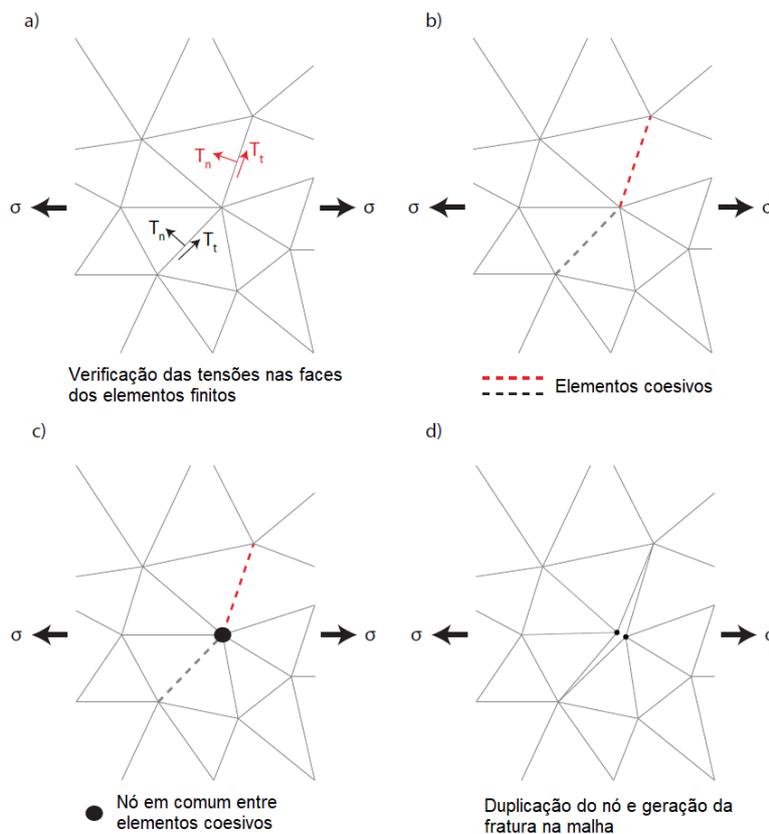


Figura 9: Exemplificação do processo de inserção dos elementos coesivos (Adaptado de Camones, 2015).

Os elementos coesivos inseridos são tratados utilizando o modelo de zona coesiva PPR descrito na seção 3.1.

As forças coesivas (\mathbf{f}_{coh}) nos nós do elemento coesivo podem ser calculadas da seguinte forma (Spring e Paulino, 2014):

$$\mathbf{f}_{\text{coh}} = \int_{\Gamma_c} \mathbf{B}^T \mathbf{R}^T \mathbf{T} dS \quad (33)$$

onde \mathbf{B} é a matriz global de deslocamento-separação, \mathbf{R} é a matriz de rotação dos deslocamentos nodais e \mathbf{T} é o vetor de tensões coesivas.

A matriz \mathbf{B} para elementos coesivos de seis nós é dada por:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & -N_1 & 0 & 0 & -N_2 & 0 & 0 & -N_3 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & -N_1 & 0 & 0 & -N_2 & 0 & 0 & -N_3 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & -N_1 & 0 & 0 & -N_2 & 0 & 0 & -N_3 \end{bmatrix} \quad (34)$$

onde N_i ($i = 1, 2, 3$) são as funções de interpolação.

A matriz de rotação \mathbf{R} é dada por:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{n}}^T \\ \bar{\mathbf{t}}_2^T \\ \bar{\mathbf{t}}_3^T \end{bmatrix} \quad (35)$$

onde $\bar{\mathbf{n}}$ é o vetor normal e $\bar{\mathbf{t}}_2$ e $\bar{\mathbf{t}}_3$ são os dois vetores tangenciais perpendiculares que formam a base do plano médio do elemento coesivo (Figura 10).

E o vetor de tensões \mathbf{T} é dado por:

$$\mathbf{T} = \begin{Bmatrix} T_n \\ T_t \frac{\Delta_2}{\Delta_t} \\ T_t \frac{\Delta_3}{\Delta_t} \end{Bmatrix} \quad (36)$$

onde Δ_2 e Δ_3 são as separações tangenciais ilustradas na Figura 11, Δ_t é a separação tangencial dada pela relação $\Delta_t = \sqrt{\Delta_2^2 + \Delta_3^2}$ e T_n e T_t são as tensões coesivas obtidas por meio do modelo de zona coesiva PPR.

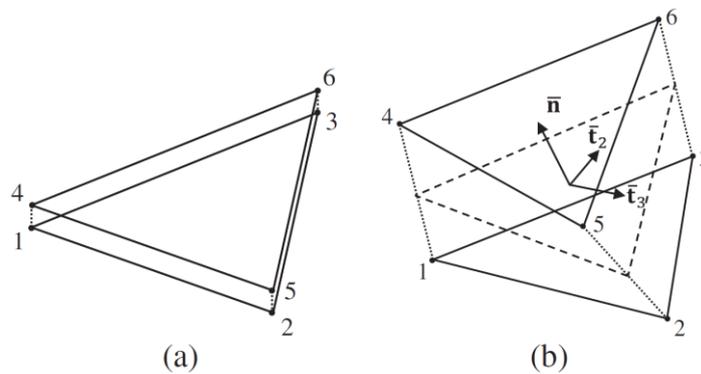


Figura 10: (a) Elemento coesivo em sua configuração inicial com espessura zero (b) Elemento coesivo na configuração deformada retratando os vetores normal e tangencial no plano médio (Spring e Paulino, 2014).

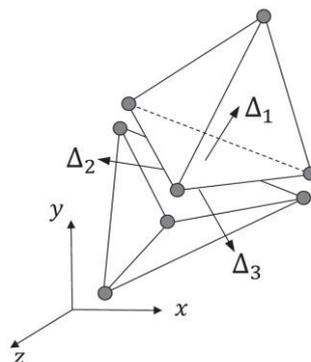


Figura 11: Definição das direções das separações (Spring e Paulino, 2014).

4.3. Detecção e interação de contatos

4.3.1. Detecção de contatos

Devido a capacidade do FEMDEM em lidar com problemas envolvendo elementos discretos que interagem entre si, é necessário que haja um algoritmo capaz de detectar, de forma eficiente, quais elementos estão em contato. Para auxiliar a realização da busca de contatos, utiliza-se o algoritmo chamado NBS (Munjiza e Andrews, 1998; Munjiza 2004). Segundo Munjiza e Andrews (1998), o

algoritmo recebe esse nome devido a não ocorrência de pesquisa binária em qualquer estágio. Nesse algoritmo tanto o uso de memória RAM, quando o tempo de CPU, são proporcionais ao número de elementos e crescem linearmente com o aumento do número de elementos (Munjiza e Andrews, 1998; Munjiza, 2004). A limitação do NBS está no fato do mesmo só ser adequado a problemas envolvendo elementos de tamanhos similares.

O algoritmo NBS é baseado na decomposição do espaço (Munjiza e Andrews, 1998). Em 3D, o espaço é subdividido em cubos com arestas de comprimento igual ao maior diâmetro (d) apresentado pelos elementos (Figura 12), que nesse caso são aproximados de esferas.

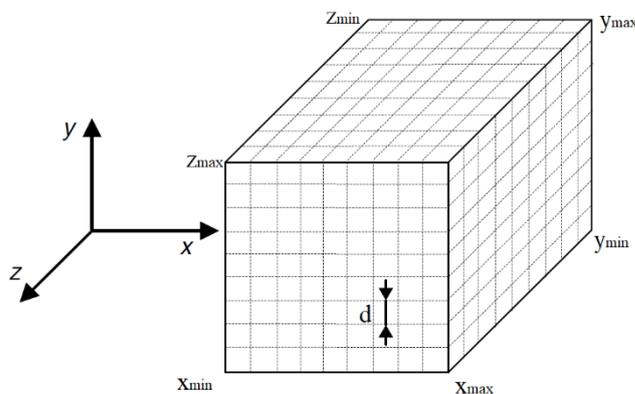


Figura 12: Decomposição do espaço (Adaptado de Munjiza, 2004).

Os limites do espaço finito (x_{\min} , y_{\min} , z_{\min} , x_{\max} , y_{\max} , z_{\max}), assim como o número de células nas direções x , y e z (n_x , n_y e n_z), são calculados utilizando as coordenadas em números inteiros i_x , i_y e i_z dos elementos, dadas por:

$$i_x = \text{int} \left(\frac{x_c}{d} \right) \quad (37)$$

$$i_y = \text{int} \left(\frac{y_c}{d} \right) \quad (38)$$

$$i_z = \text{int} \left(\frac{z_c}{d} \right) \quad (39)$$

onde x_c , y_c e z_c são as coordenadas do centroide do elemento.

O valor de x_{\min} é dado pelo mínimo valor de i_x e o valor de x_{\max} pelo máximo valor de i_x . De maneira similar se obtêm os valores de y_{\min} , y_{\max} , z_{\min} e z_{\max} . O número de células nas direções x , y e z são obtidos da seguinte forma:

$$n_x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{d} \quad (40)$$

$$n_y = \frac{y_{\max} - y_{\min}}{d} \quad (41)$$

$$n_z = \frac{z_{\max} - z_{\min}}{d} \quad (42)$$

Com o espaço finito definido realiza-se o mapeamento dos elementos nas células. Esses elementos são mapeados utilizando suas coordenadas i_x , i_y e i_z . Em seguida é feita a busca de contatos entre as células contendo elementos e suas células vizinhas para determinar os elementos potencialmente em contato. Segundo Munjiza (2004), das 26 células vizinhas que existem no total, apenas 13 delas precisam ser checadas (Figura 13). Todos esses procedimentos são feitos utilizando listas encadeadas, o que reduz a quantidade de memória requerida. Detalhes sobre a implementação do algoritmo NBS em 3D podem ser encontrados em Munjiza (2004).

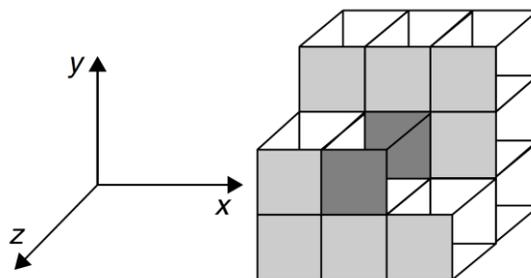


Figura 13: Célula central e células vizinhas (Munjiza, 2004).

Os pares de elementos potencialmente em contato são testados para determinar se os mesmos estão realmente em contato. Essa checagem é feita utilizando um algoritmo, baseado no Teorema do Eixo de Separação (*Separating Axis Theorem* - SAT), desenvolvido por Ganovelli, Ponchio e Rocchini (Ganovelli, Ponchio e Rocchini, 2002). De acordo com o SAT, se dois poliedros convexos não se sobrepõem, existe um eixo no qual as suas projeções se tornam disjuntas (Lisjak

et al., 2018). Esse algoritmo é capaz de testar rapidamente se dois tetraedros se sobrepõem.

Por fim, quando existe a garantia de que um par de elementos está realmente em contato, entra em ação o algoritmo responsável pela interação entre contatos.

4.3.2. Interação de contatos

A interação entre corpos em contato é avaliada utilizando o método da penalidade (Munjiza e Andrews, 2000; Munjiza, 2004). De acordo com Munjiza (2004), o método da penalidade, em sua forma clássica, assume que dois corpos em contato penetram um no outro, e essa penetração resulta em forças de contato.

Na avaliação das forças de contato um dos elementos em contato é definido como *contactor* (E_c) e o outro como *target* (E_t) (Figura 14). A força de contato total é obtida integrando a diferença entre o gradiente do potencial do *contactor* e o gradiente do potencial do *target* sobre o volume total sobreposto ($V = E_t \cap E_c$) como:

$$\mathbf{f}_c = \int_{V = E_t \cap E_c} (\text{grad}\varphi_c - \text{grad}\varphi_t) dV \quad (43)$$

onde φ_c e φ_t são os potenciais do *contactor* e do *target*, respectivamente.

A Equação (43) pode ser escrita como uma integral sobre a superfície S do volume sobreposto:

$$\mathbf{f}_c = \int_{S_{E_t \cap E_c}} \mathbf{n}(\varphi_c - \varphi_t) dS \quad (44)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal a superfície do volume sobreposto.

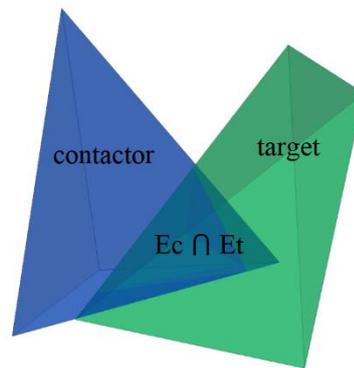


Figura 14: Elementos finitos em contato.

Segundo Munjiza (2004) e Smoljanović et al. (2018), para a implementação numérica da integração das forças de contato é necessário que tanto o *target* quanto o *contactor* sejam subdivididos em quatro subtetraedros (0-1-2-C, 1-3-2-C, 2-3-1-C, 3-1-0-C), onde C é o centroide, como mostra a Figura 15.

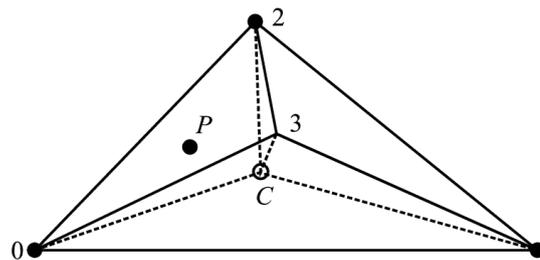


Figura 15: Subdivisão do tetraedro em quatro subtetraedros (Smoljanović et al., 2018).

Para cada par de subtetraedros (T_i, t_j), $i = 1, 2, 3, 4$; $j = 1, 2, 3, 4$, onde T representa os subtetraedros do *target* e t os subtetraedros do *contactor*, são realizadas as seguintes operações (Munjiza, 2004; Smoljanović et al., 2018):

- a) Encontra-se o polígono convexo definido pelos pontos $S = (S_1, S_2, S_3, \dots, S_i, \dots, S_n)$ dado pela interseção entre a base do subtetraedro do *contactor* e o subtetraedro do *target* (Figura 16)

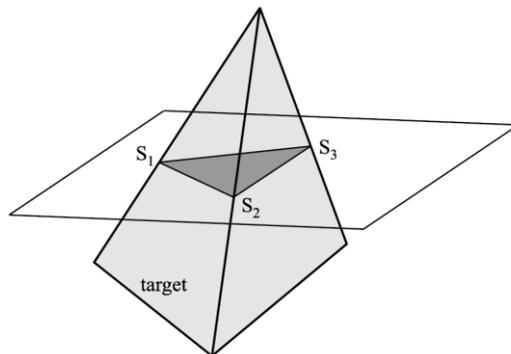


Figura 16: Interseção do subtetraedro do *target* com o plano da base do subtetraedro do *contactor* (Smoljanović et al., 2018).

- b) Encontra-se o polígono convexo $B = (B_1, B_2, B_3, \dots, B_i, \dots, B_n)$ definido pela interseção entre o polígono S e a base do subtetraedro do *contactor* (Figura 17)

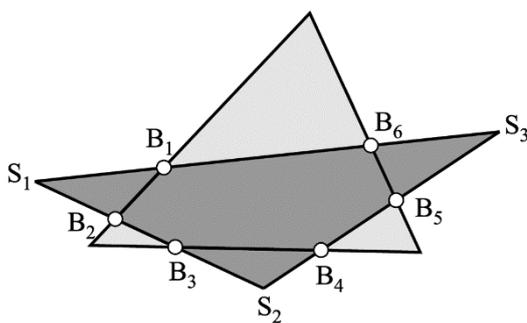


Figura 17: Interseção do subtetraedro do *target* com a base do subtetraedro do *contactor* (Smoljanović et al., 2018).

- c) Calcula-se o valor do potencial φ do *target* em cada nó do polígono B , $\varphi = (\varphi(B_1), \varphi(B_2), \varphi(B_3), \dots, \varphi(B_i), \dots, \varphi(B_n))$. O cálculo do potencial para um ponto P qualquer no interior do tetraedro é dado por:

$$\varphi(P) = p \left(\frac{V_{i-j-k-P}}{4V_{i-j-k-C}} \right) \quad (45)$$

onde p é o parâmetro de penalidade, $V_{i-j-k-C}$ é o volume do tetraedro $i-j-k-C$ e $V_{i-j-k-P}$ é o volume do subtetraedro $i-j-k-P$, isto é, o tetraedro no qual um dos nós é substituído pelo ponto P .

- d) A força de contato normal total \mathbf{f}_{cB} é calculada por meio da integração sobre o polígono B. A integração é realizada dividindo o polígono B em triângulos e adicionando as forças de contato de cada triângulo (Figura 18).

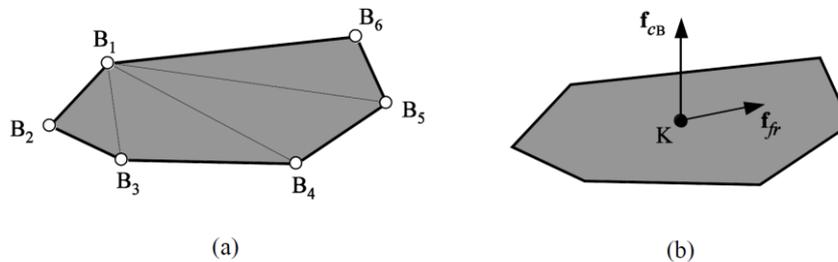


Figura 18: Polígono B (a) integração da força de contato (b) forças de contato normal e tangencial (Smoljanović et al., 2018).

Para o cálculo das forças tangenciais foi utilizada uma metodologia apresentada por Munjiza, Knight e Rougier (2011). Nela as forças tangenciais são calculadas utilizando a lei de atrito de Coulomb:

$$\mathbf{f}_{fr} = f_{cB}\mu_f \quad (46)$$

onde μ_f é o coeficiente de atrito.

O vetor das forças tangenciais atuando no polígono B é dado por:

$$\mathbf{f}_{fr} = -f_{fr} \frac{\mathbf{v}_{rt}(\mathbf{K})}{|\mathbf{v}_{rt}(\mathbf{K})|} \quad (47)$$

onde $\mathbf{v}_{rt}(\mathbf{K})$ refere-se à velocidade relativa no ponto K (Figura 18b) entre *target* e *contactor* projetada no plano do polígono B.

Por fim, tanto a força de contato normal total quanto a força tangencial são distribuídas entre os nós do *target* e os nós do *contactor* na forma de forças nodais equivalentes.

4.4. Resolução das equações de equilíbrio

As equações de equilíbrio são resolvidas utilizando a técnica da Relaxação Dinâmica. De acordo com Figueiredo (1991), a técnica iterativa explícita da Relaxação Dinâmica tem como proposta a obtenção da solução de regime permanente mediante o uso de um algoritmo de análise transiente. Para isso são introduzidas massas inerciais e forças de amortecimento viscosas as equações de equilíbrio (Figueiredo, 1991), sendo as mesmas apresentadas da seguinte forma:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}^n + \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}^n = \mathbf{F}^n \quad (48)$$

onde \mathbf{M} é a matriz de massas, \mathbf{C} é a matriz de coeficientes de amortecimento, $\ddot{\mathbf{u}}$ é o vetor de acelerações nodais, $\dot{\mathbf{u}}$ é o vetor de velocidades nodais, os sobrescritos n referem-se ao n -ésimo incremento e \mathbf{F} é o vetor de forças nodais que inclui as forças devido ao carregamento externo, as forças de contato, as forças coesivas e as forças internas.

Discretizando a Equação (48) por diferenças finitas centrais, e admitindo que \mathbf{M} é diagonal, ou seja, trata-se de uma matriz de massas concentradas, e que $\mathbf{C} = \alpha\mathbf{M}$, tem-se:

$$\dot{\mathbf{u}}^{n+1/2} = (C_1\dot{\mathbf{u}}^{n-1/2} + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{F}^n\Delta t)C_2 \quad (49)$$

Os deslocamentos $\mathbf{u}^{(n+1)}$ são,

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \dot{\mathbf{u}}^{n+1/2}\Delta t \quad (50)$$

onde \mathbf{u} é o vetor de deslocamentos nodais, Δt é o passo de tempo e C_1 e C_2 são dados por:

$$C_1 = 1 - \frac{\alpha\Delta t}{2} \quad (51)$$

E,

$$C_2 = \frac{1}{1 + \frac{\alpha \Delta t}{2}} \quad (52)$$

onde α é um coeficiente relacionado com o amortecimento (Figueiredo, 1991).

Com os deslocamentos obtidos no incremento de tempo $n+1$, as forças são novamente computadas no novo incremento e o procedimento é repetido até que o sistema entre em equilíbrio. A Tabela 1 apresenta a integração numérica em forma algorítmica. Vale ressaltar que as velocidades são calculadas no centro do intervalo de tempo e os deslocamentos nos seus extremos.

Tabela 1: Algoritmo da integração numérica

Algoritmo – Integração numérica	
1 – Atribuição das condições iniciais	
	\mathbf{u}^0 (valor dado)
	$\dot{\mathbf{u}}^0 = 0$
2 – Seleção dos parâmetros	
	Montagem da matriz de massa diagonal (\mathbf{M})
	Cálculo do α e Δt
3 – Cálculo do vetor de forças nodais (\mathbf{F})	
	Se $\mathbf{F} \cong 0$, pare
	Senão, continue
4 – Cálculo das velocidades	
	Se $n = 0$,
	$\dot{\mathbf{u}}^{1/2} = (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{F}^n) \Delta t / 2$
	Senão,
	$\dot{\mathbf{u}}^{n+1/2} = (C_1 \dot{\mathbf{u}}^{n-1/2} + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{F}^n \Delta t) C_2$
5 – Cálculo dos deslocamentos	
	$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \dot{\mathbf{u}}^{n+1/2} \Delta t$
6 – Atualização do próximo passo	
	$n = n + 1$
7 – Retorne	
	Se a análise for linear, retornar para 3
	Se a análise for não-linear, retornar para 2

O tipo de estratégia de controle adotada para o amortecimento foi o *auto-damping* global. Segundo Figueiredo (1991), neste tipo de estratégia a constante α é ajustada continuamente, visando alcançar o amortecimento crítico, de modo a fazer com que o algoritmo convirja o mais rápido possível. A Tabela 2 apresenta o algoritmo do *auto-damping* global.

Tabela 2: Algoritmo do *auto-damping* global

Algoritmo – *Auto-Damping* global

Se iteração = 0, calcula α

$$\alpha = 2\pi f * \text{FRAC}$$

Senão,

1 – Cálculo e soma das energias cinéticas de cada nó do modelo

$$E_{\text{cinética}} = E_{\text{cinética}} + \frac{mv^2}{2}$$

2 – Cálculo da variação da energia cinética entre a iteração atual e a anterior

$$\Delta E_{\text{cinética}} = E_{\text{cinética}} - E_{\text{cinética-anterior}}$$

3 – Cálculo do DRAT

Se $\Delta E_{\text{cinética}} \neq 0$,

$$\text{DRAT} = \frac{2E_{\text{cinética}} \alpha \Delta t}{|\Delta E_{\text{cinética}}|}$$

Se $\text{DRAT} > \text{ADFAC}$,

$$\alpha = \frac{\alpha}{\text{ADMUL}}$$

Senão,

$$\alpha = \alpha \text{ADMUL}$$

4 – Atualização da energia cinética

$$E_{\text{cinética-anterior}} = E_{\text{cinética}}$$

Os termos apresentados na Tabela 2 são:

- f: frequência de vibração. Utilizado 1 Hz;
- FRAC: fração de tempo;
- ADMUL: constante de atualização do *auto-damping* global. Utilizado 1,05;
- ADFAC: alvo procurado pelo algoritmo. Utilizado 0,9;

- DRAT: razão entre a potência dissipada pelo amortecimento e a variação da energia cinética.

Devido ao caráter condicionalmente estável da integração explícita é necessário que o passo de tempo Δt seja menor do que um valor crítico para que seja mantida a estabilidade. O cálculo do passo de tempo crítico é dado por (Figueiredo, 1991):

$$\Delta t \leq \frac{H_{\min}}{2} \sqrt{\frac{\rho(1-2\nu)(1+\nu)}{E(1-\nu)}} \text{TFRAC} \quad (53)$$

onde ρ é a densidade, ν é o coeficiente de Poisson, E é o módulo de elasticidade, H_{\min} é o menor comprimento das arestas dos elementos tetraédricos e TFRAC ($\text{TFRAC} < 1$) é uma variável destinada a diminuir mais o Δt caso isso seja necessário.

5 Verificação do código

A verificação das implementações feitas no código foi realizada mediante a simulação de ensaios de laboratório comumente empregados na área da mecânica das rochas. Os ensaios simulados foram: o ensaio brasileiro (ensaio de tração indireta), o ensaio de compressão simples e o ensaio de tenacidade à fratura. Também foi realizado uma simulação de queda de bloco com o intuito de mostrar a capacidade do código em simular a transição do contínuo para o descontínuo. Para a simulação do ensaio brasileiro e do ensaio de compressão simples foram criados modelos de dois materiais diferentes, sendo eles um calcário relativamente homogêneo e gesso, enquanto que para a simulação do ensaio de tenacidade à fratura somente um modelo utilizando gesso foi criado. As propriedades, dimensões e resultados para comparação dos modelos de calcário foram retirados de Fukuda et al. (2019), já as propriedades, dimensões e resultados para comparação dos modelos de gesso foram retirados de Tatone e Grasselli (2012). As Tabelas 3 e 4 apresentam as propriedades dos materiais utilizados nos modelos. Todos os exemplos foram realizados utilizando um computador com processador Intel Core i9-9900KF CPU @ 3.6 GHz e 16,0 GB de memória RAM.

Tabela 3: Propriedades do material calcário.

Propriedade	Valor	Unidade
Densidade (ρ)	1800	kg/cm ³
Módulo de elasticidade (E)	12,2	GPa
Coefficiente de Poisson (ν)	0,25	-
Resistência à tração (f_t)	1,2	MPa
Coesão (c)	4,2	MPa
Ângulo de atrito (ϕ)	25	°
Energia da fratura do Modo I (G_{II})	2	J/m ²
Energia da fratura do Modo II (G_{III})	26,5	J/m ²

Tabela 4: Propriedades do material gesso.

Propriedade	Valor	Unidade
Densidade (ρ)	1850	kg/cm ³
Módulo de elasticidade (E)	800	MPa
Coefficiente de Poisson (ν)	0,4	-
Resistência à tração (f_t)	0,3	MPa
Coesão (c)	0,51	MPa
Ângulo de atrito (ϕ)	33	°
Energia da fratura do Modo I (G_{II})	2,4	J/m ²
Energia da fratura do Modo II (G_{III})	20,0	J/m ²

5.1. Queda de bloco

Para a realização da simulação da queda de bloco, foi modelado um bloco cúbico com arestas com comprimento igual a 2,5 m. A malha é formada por 196 elementos e 87 nós. As propriedades utilizadas no bloco foram as mesmas do material calcário (Tabela 3). O bloco foi solto de uma altura de 2 m acima de uma base considerada rígida, sendo movido apenas pela ação da gravidade. A Figura 19 apresenta os detalhes do modelo. A valor da aceleração da gravidade utilizado foi de 9,81 m/s².

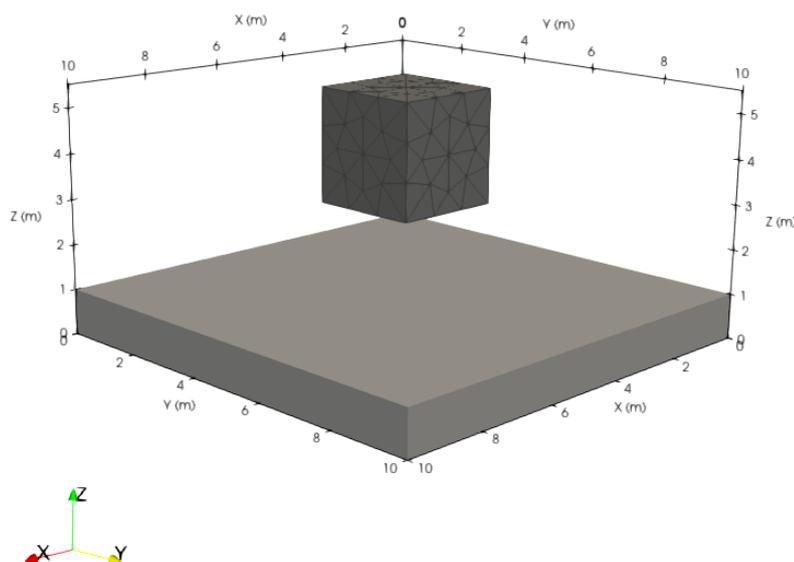


Figura 19: Detalhes do modelo da simulação de queda de bloco

Após entrar em contato com a superfície da base, o bloco se rompe e se fragmenta (Figura 20). Com isso nós temos a transição do contínuo, que era representado pelo bloco antes de se romper, quando era considerado intacto, para o descontínuo, que é quando o bloco se rompe gerando fragmentos. A capacidade de simular a transição do contínuo para o descontínuo é uma das características do FEMDEM.

A Figura 20 também ilustra a importância do mecanismo de interação entre contatos. Os elementos discretos (bloco e base) interagem entre si durante a simulação, assim como os fragmentos gerados pela ruptura do bloco. Sem esse mecanismo esse tipo de interação não seria observado.

Vale ressaltar que o exemplo é apenas qualitativo, servindo somente para ilustrar as características do FEMDEM apresentadas no Capítulo 2.

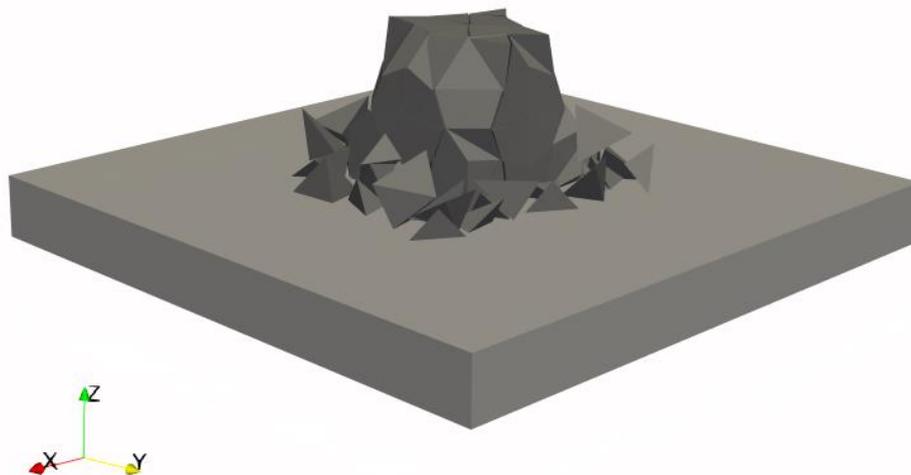


Figura 20: Bloco fragmentado após a queda

5.2. Ensaio brasileiro - Calcário

Para a simulação do ensaio brasileiro no material calcário, foi modelado um corpo de prova com dimensões 51,7 mm de diâmetro e 25,95 mm de espessura. Esse corpo de prova foi discretizado em elementos finitos tetraédricos com comprimento nominal de aresta igual a 2 mm, sendo a malha constituída de 32098 elementos e 6549 nós. O carregamento foi aplicado por meio de dois pratos rígidos

movidos um em direção ao outro com velocidade de 0,05 m/s. Detalhes do modelo podem ser vistos na Figura 21. O tempo de simulação do ensaio foi de aproximadamente 15 horas e 14 minutos.

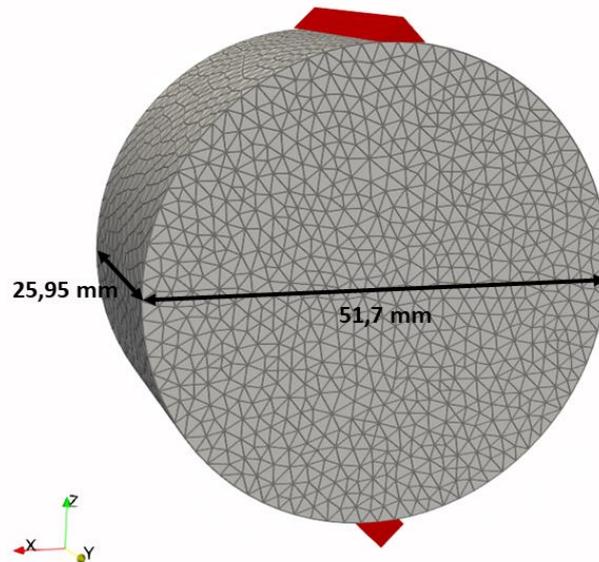


Figura 21: Detalhes do modelo de calcário para o ensaio brasileiro.

Devido à falta de resultados experimentais para esse ensaio, a verificação foi feita utilizando o resultado da simulação realizada por Fukuda et al. (2019).

A Figura 22 apresenta as curvas tensão de tração indireta-deslocamento para a simulação realizada com o código desenvolvido e para a simulação realizada por Fukuda et al. (2019). Dela nós temos que os valores de resistência à tração indireta obtidos tanto com o código desenvolvido, como por Fukuda et al. (2019), se aproximam bastante, sendo 1,64 MPa para o código desenvolvido e 1,65 MPa para Fukuda et al., ou seja, uma diferença menor do que 1%.

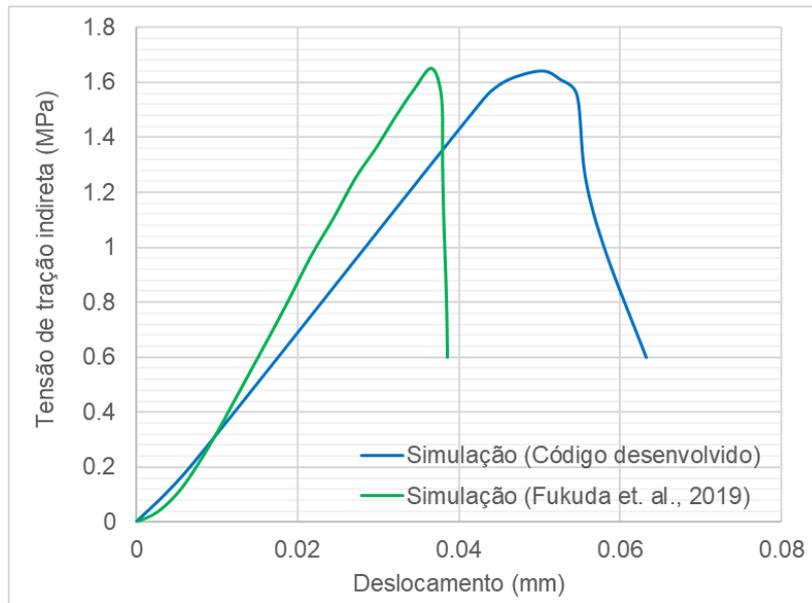


Figura 22: Curvas tensão de tração indireta-deslocamento do ensaio brasileiro do modelo de calcário.

A Figura 23 exibe o padrão de fraturamento apresentado pelo modelo de calcário submetido ao ensaio brasileiro. Nela podemos ver que o padrão apresentado pelo modelo numérico muito se assemelha aos padrões usualmente encontrados em experimentos (Figura 24). É possível notar a ocorrência de uma separação por tração ao longo do eixo de aplicação dos carregamentos, que é uma feição característica desse tipo de ensaio. Além disso, há a ocorrência de rupturas por cisalhamento próximas as regiões de aplicação dos carregamentos.

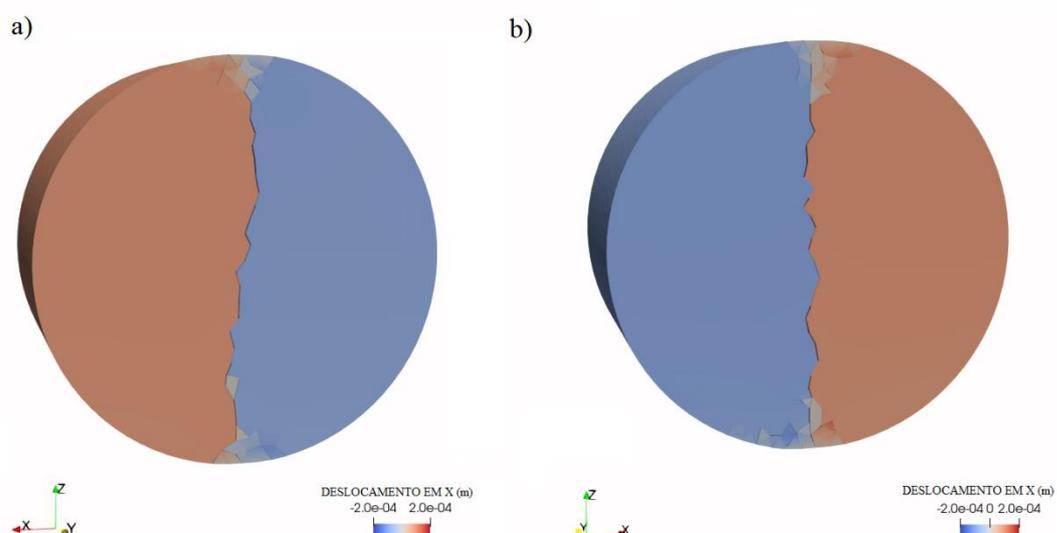


Figura 23: Padrão de fraturamento do ensaio brasileiro do modelo de calcário: a) vista 1 b) vista 2.

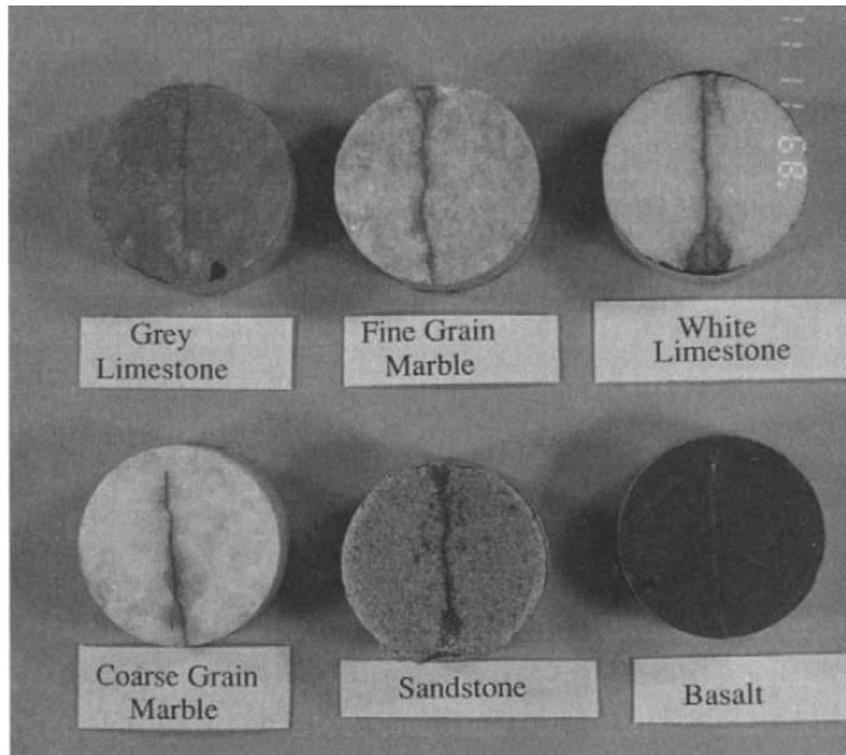


Figura 24: Corpos de prova de diferentes tipos de rocha após a realização de ensaios brasileiro (Guo, Aziz e Schmidt, 1993)

5.3. Ensaio brasileiro - Gesso

Para a simulação do ensaio brasileiro no material gesso, foi modelado um corpo de prova com dimensões 50 mm de diâmetro e com a espessura sendo 25 mm, ou seja, a metade do diâmetro. A escolha de tal espessura se deu devido a inexistência de tal valor no trabalho de Tatone e Grasselli (2012), já que nesse trabalho a análise é do tipo bidimensional. Esse corpo de prova foi discretizado em elementos finitos tetraédricos com comprimento nominal de aresta igual a 2 mm, sendo a malha constituída por 28821 elementos e 5878 nós. O carregamento foi aplicado por meio de dois pratos rígidos movidos um em direção ao outro com velocidade de 0,02 m/s. Detalhes do modelo podem ser vistos na Figura 25. O tempo de simulação do ensaio foi de aproximadamente 9 horas e 33 minutos.

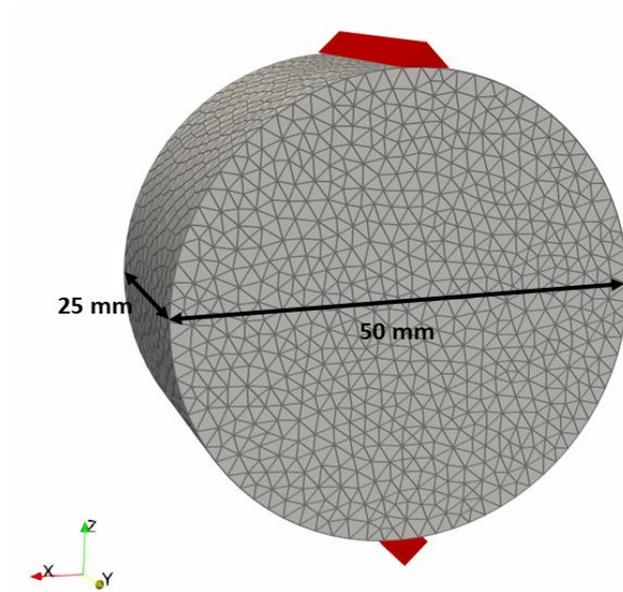


Figura 25: Detalhes do modelo de gesso para o ensaio brasileiro.

A Figura 26 mostra a curva tensão de tração indireta-deslocamento do ensaio simulado com o código desenvolvido e a resistência à tração indireta obtida experimentalmente.

O valor da resistência à tração indireta obtido com o código desenvolvido foi de aproximadamente 0,31 MPa. Como o valor experimental foi de 0,3 MPa, houve uma diferença de 0,01 MPa entre o valor experimental e o valor obtido pelo código desenvolvido. Com isso nós temos que o valor simulado foi cerca de 3,33% maior do que o valor experimental.

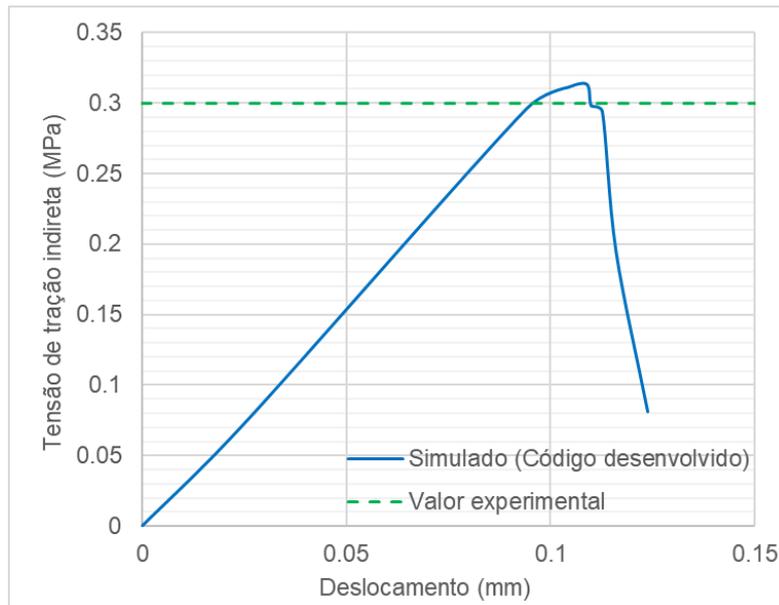


Figura 26: Curvas tensão de tração indireta-deslocamento do ensaio brasileiro do modelo de gesso.

Na Figura 27 podemos ver o padrão de fraturamento apresentado pelo modelo de gesso submetido ao ensaio brasileiro. Assim como no modelo de calcário, o modelo de gesso apresenta uma separação por tração ao longo do eixo de aplicação dos carregamentos. Ademais, verifica-se a ocorrência de rupturas por cisalhamento próximas as regiões de aplicação dos carregamentos.

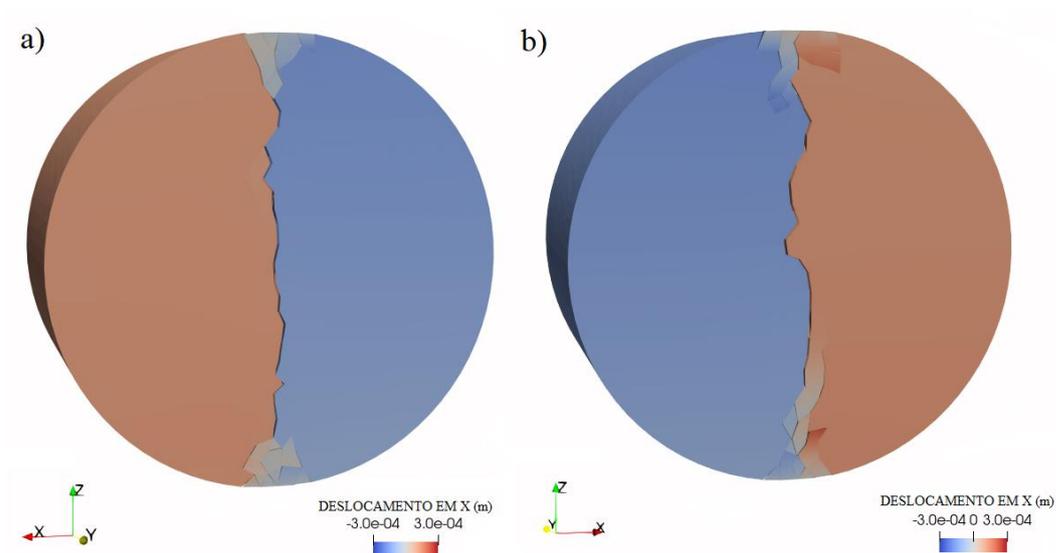


Figura 27: Padrão de fraturamento do ensaio brasileiro do modelo de gesso: a) vista 1 b) vista 2.

5.4. Ensaio de compressão simples - Calcário

Para a simulação do ensaio de compressão simples no material calcário, foi modelado um corpo de prova com dimensões 51,7 mm de diâmetro e 129,5 mm de comprimento. Esse corpo de prova foi discretizado em elementos finitos tetraédricos com comprimento nominal de aresta igual a 3 mm, sendo a malha constituída de 46303 elementos e 9171 nós. O carregamento foi aplicado por meio de dois pratos rígidos movidos um em direção ao outro com velocidade de 0,1 m/s. Detalhes do modelo podem ser vistos na Figura 28. O tempo de simulação do ensaio foi de aproximadamente 35 horas e 17 minutos.

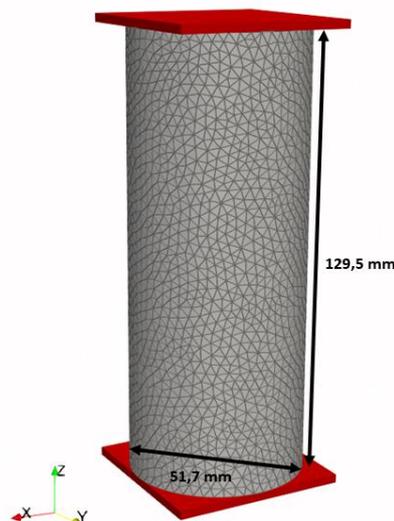


Figura 28: Detalhes do modelo de calcário para o ensaio de compressão simples.

A Figura 29 mostra a curva tensão axial-deformação axial do ensaio simulado e a curva tensão axial-deformação axial experimental. Da curva do ensaio simulado nós temos que a resistência à compressão simples é de aproximadamente 15,6 MPa. Já a resistência à compressão simples experimental é de aproximadamente 16,8 MPa. Com isso nós temos que a diferença entre os valores de resistência à compressão simples dados pela simulação e pelo ensaio de laboratório foi de 1,2 MPa, ou seja, o valor da resistência obtido pelo código desenvolvido foi cerca de 7,14% menor do que o valor obtido em laboratório.

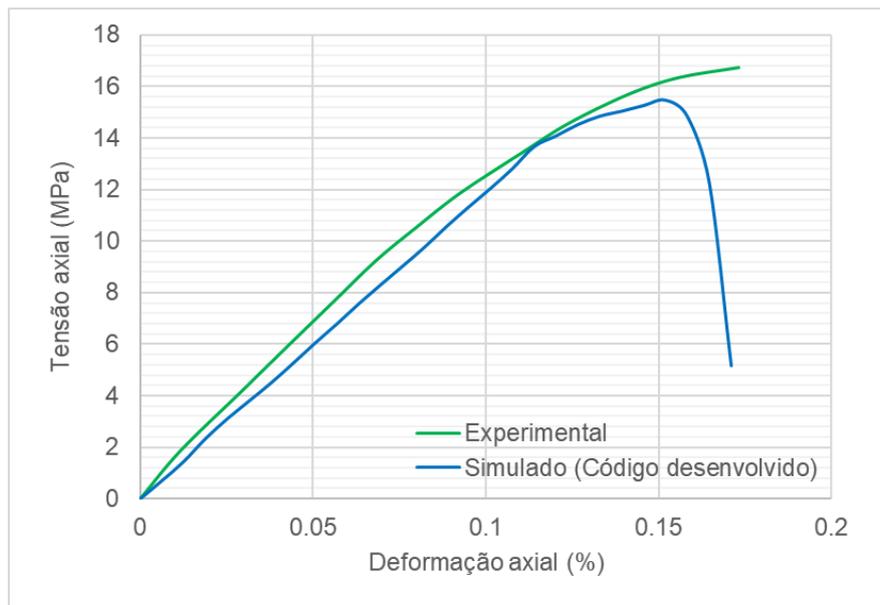


Figura 29: Curva tensão axial-deformação axial do ensaio de compressão simples do modelo de calcário.

A Figura 30 exibe o padrão de fraturamento apresentado pelo modelo de calcário submetido ao ensaio de compressão simples. Nela podemos observar feições que se assemelham a ruptura por cisalhamento. Na Figura 31 é mostrada uma comparação entre o padrão de fraturamento obtido na simulação e o padrão de fraturamento do corpo de prova ensaiado em laboratório.

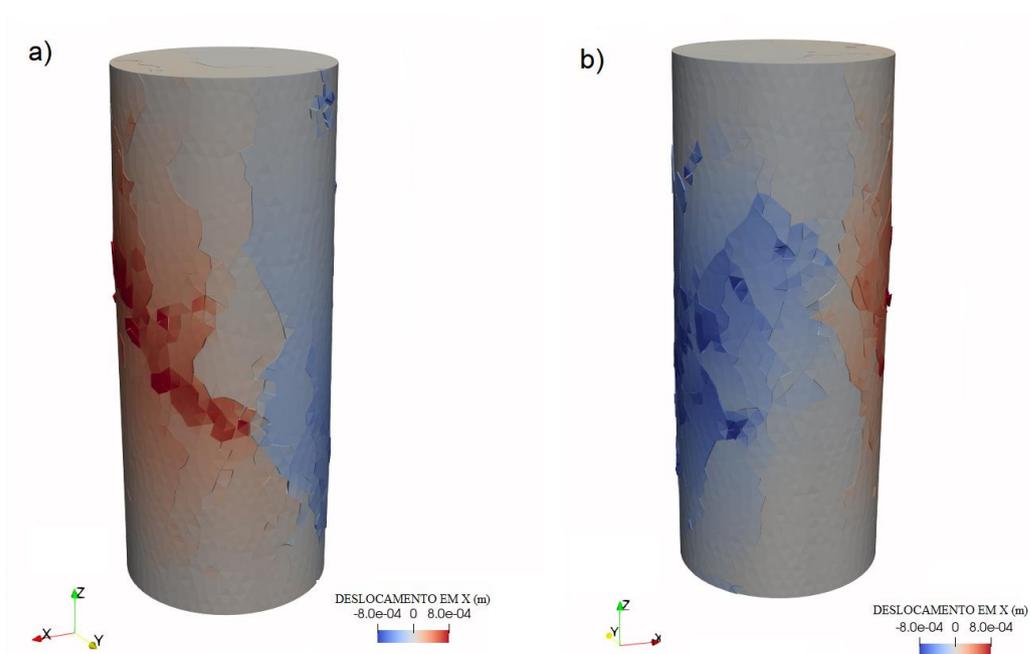


Figura 30: Padrão de fraturamento do ensaio de compressão simples do modelo de calcário: a) vista 1 b) vista 2.

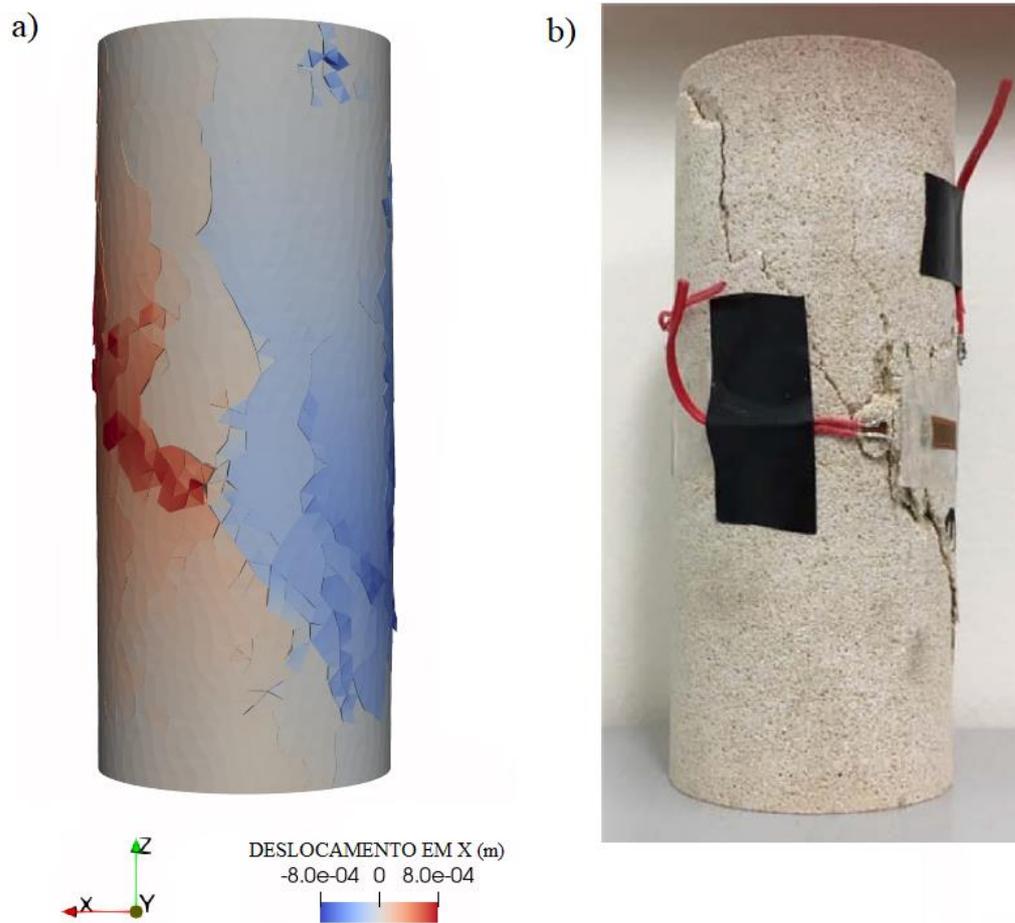


Figura 31: Comparação entre o padrão de fraturamento obtido da simulação numérica e experimental: a) simulação numérica, b) experimental (Fukuda et al, 2019).

5.5. Ensaio de compressão simples - Gesso

Para a simulação do ensaio de compressão simples no material gesso, foi modelado um corpo de prova com dimensões 50 mm de diâmetro e 100 mm de comprimento. Esse corpo de prova foi discretizado em elementos finitos tetraédricos com comprimento nominal de aresta igual a 2 mm, sendo a malha constituída de 110914 elementos e 20677 nós. O carregamento foi aplicado por meio de dois pratos rígidos movidos um em direção ao outro com velocidade de 0,05 m/s. Detalhes do modelo podem ser vistos na Figura 32. O tempo de simulação do ensaio foi de aproximadamente 57 horas e 53 minutos.

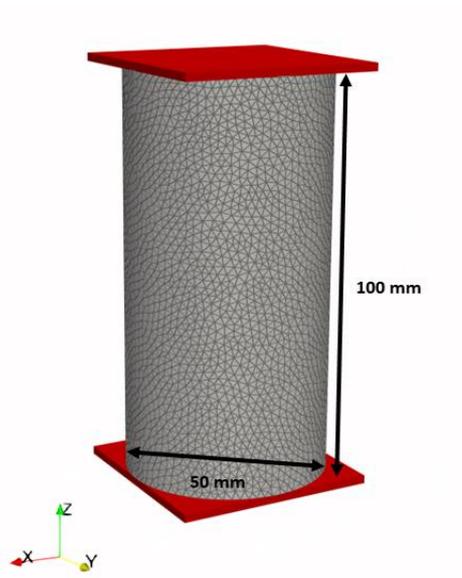


Figura 32: Detalhes do modelo de gesso para o ensaio de compressão simples.

A Figura 33 mostra a curva tensão axial-deformação axial do ensaio simulado e a resistência à compressão simples obtida experimentalmente. Dela nós temos que a resistência à compressão simples é de aproximadamente 1,8 MPa. Como o valor experimental foi de 2 MPa, houve uma diferença de 0,2 MPa entre o valor experimental e o valor obtido pelo código desenvolvido. Com isso nós temos que a resistência à compressão simples obtida com o código desenvolvido foi cerca de 10% menor do que o valor experimental.

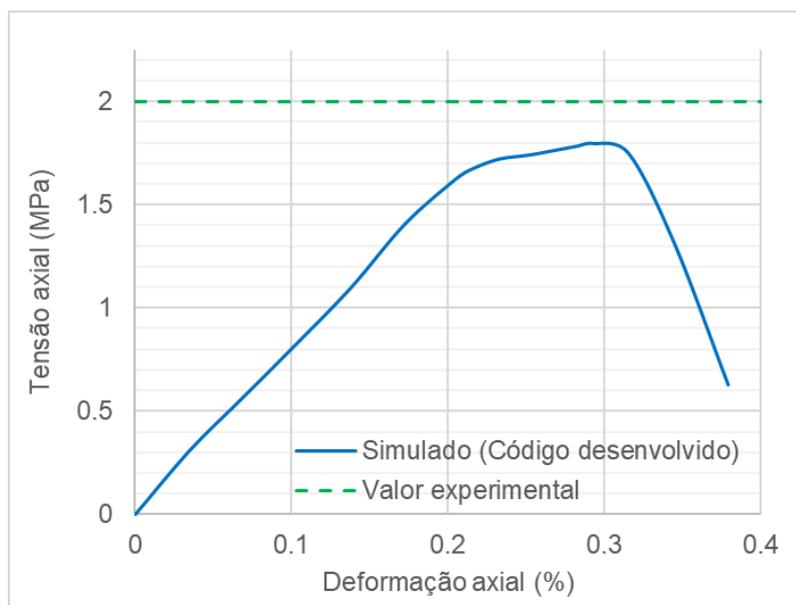


Figura 33: Curva tensão axial-deformação axial do ensaio de compressão simples do modelo de gesso.

A Figura 34 exibe o padrão de fraturamento apresentado pelo modelo de gesso submetido ao ensaio de compressão simples. Nela podemos observar que a ruptura se deu pela ocorrência de fraturas múltiplas.

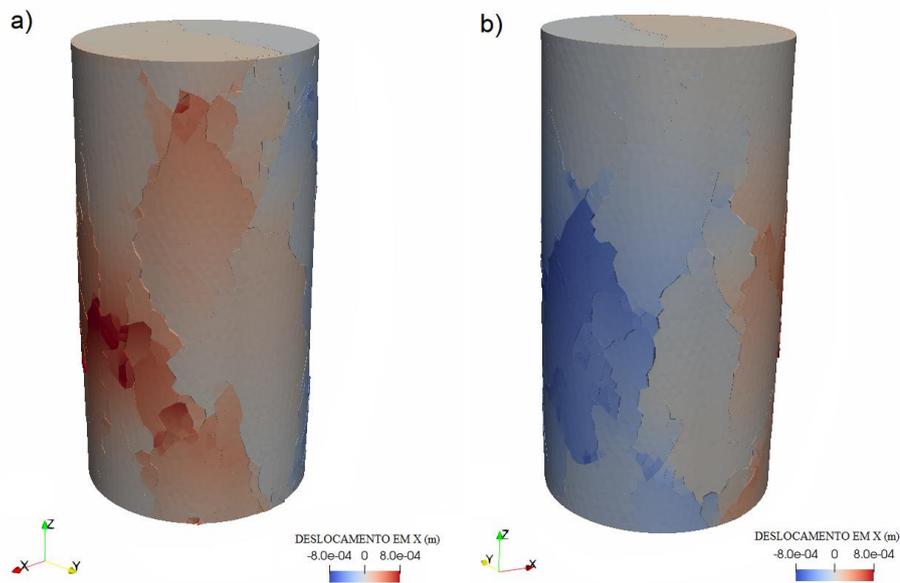


Figura 34: Padrão de fraturamento do ensaio de compressão simples do modelo de gesso: a) vista 1 b) vista 2.

5.6. Ensaio de tenacidade à fratura

O ensaio de tenacidade à fratura simulado foi o ensaio do tipo CCNBD (*Cracked Chevron Notched Brazilian Disk*). As dimensões utilizadas no corpo de prova foram as dimensões padrão sugeridas pela ISRM (*International Society for Rock Mechanics*) (Fowell, 1995) apresentadas na Tabela 5. A Figura 35 apresenta detalhes da geometria do corpo de prova para o ensaio CCNBD.

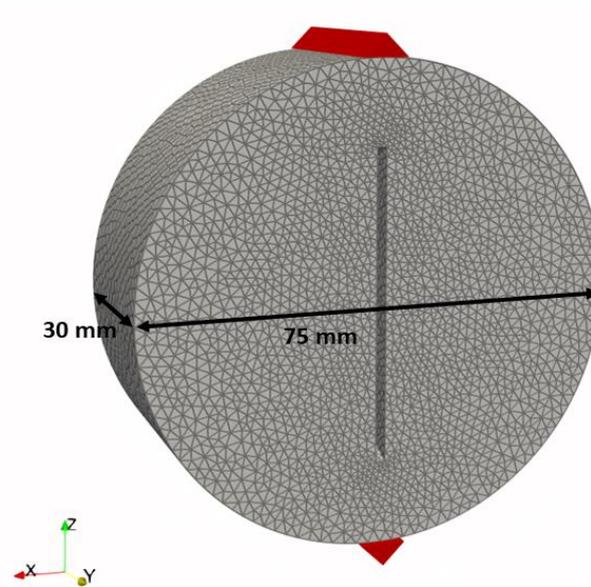


Figura 36: Detalhes do modelo para o ensaio de tenacidade à fratura CCNBD.

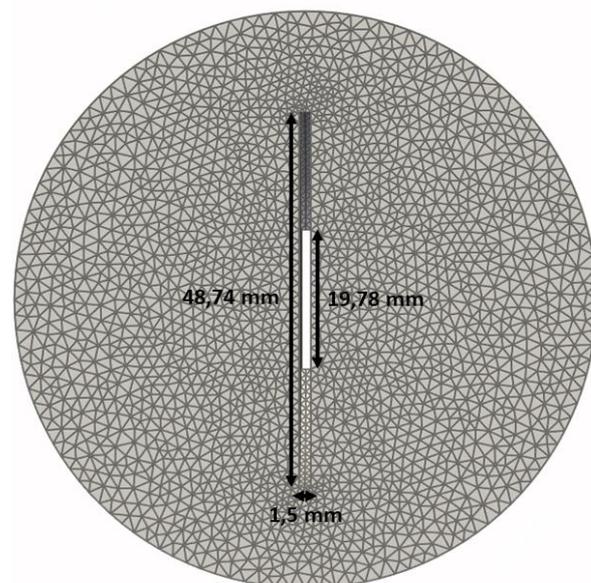


Figura 37: Detalhes do entalhe do modelo para o ensaio CCNBD.

A Figura 38 mostra a curva força-deslocamento do ensaio simulado. Por meio dela obtemos a carga de pico que será utilizada no cálculo da tenacidade à fratura no modo I de carregamento (K_{IC}). A tenacidade à fratura, de acordo com a ISRM (Fowell, 1995), deve ser calculada por meio da seguinte equação:

$$K_{IC} = \frac{P_{\max}}{B\sqrt{D}} Y_{\min}^* \quad (54)$$

onde P_{\max} é a carga de pico, B é a espessura do corpo de prova, D é o diâmetro do corpo de prova e Y_{\min}^* é o valor crítico do fator de intensidade de tensão adimensional do corpo de prova.

O valor da tenacidade à fratura no modo I, utilizado para comparação com o resultado obtido pelo código desenvolvido, foi calculado por meio da relação apresentada por Irwin (1957):

$$G_{fl} = \frac{K_{IC}^2}{E} \quad (55)$$

onde G_{fl} é a energia da fratura no modo I, E é o módulo de elasticidade e K_{IC} é a tenacidade à fratura no modo I.

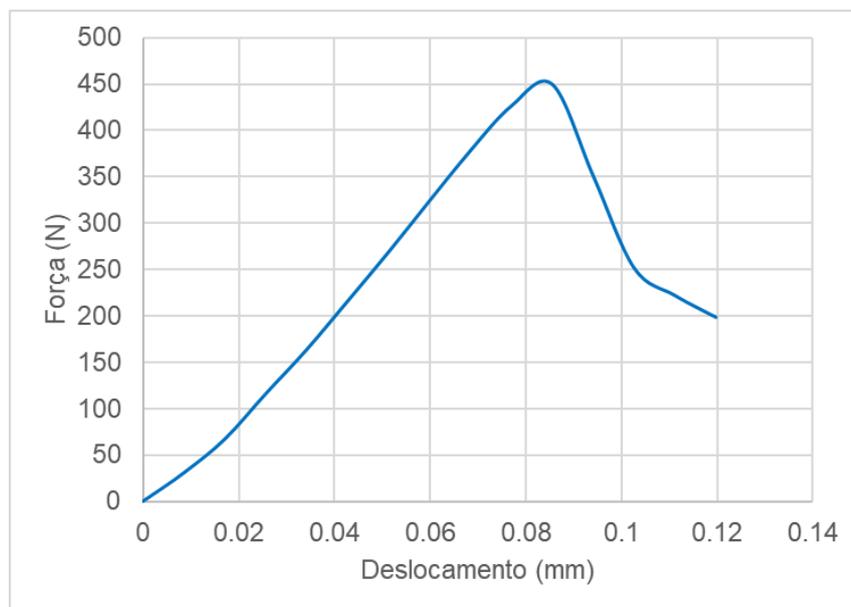
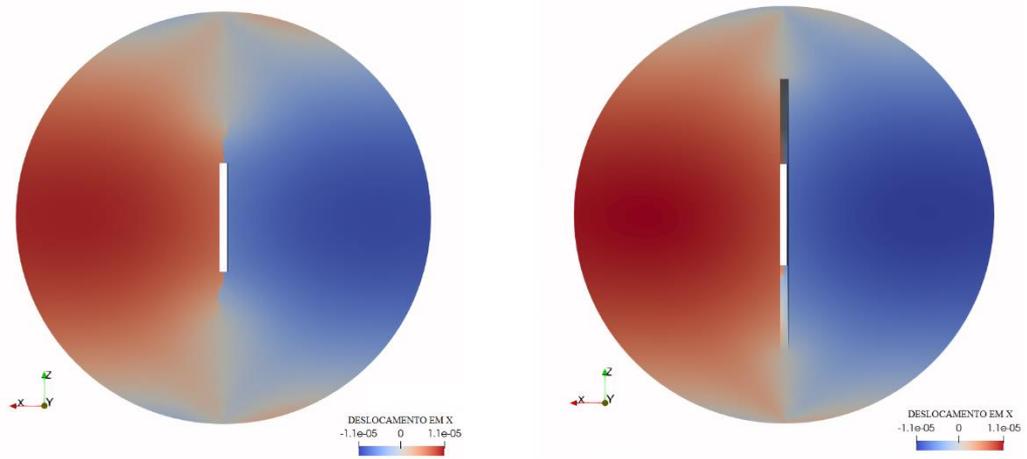


Figura 38: Curva força-deslocamento do ensaio de tenacidade à fratura CCNBD.

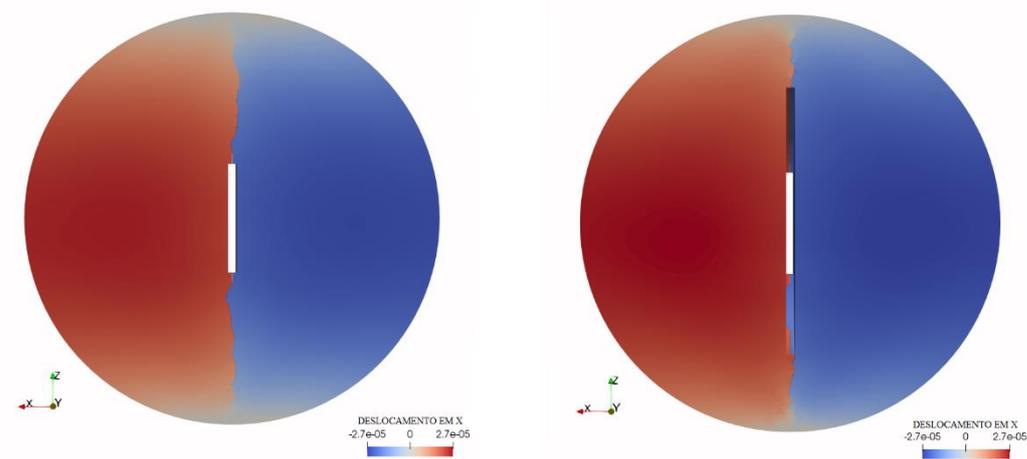
O valor da tenacidade à fratura no modo I obtido pelo código desenvolvido foi de $0,046 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, já o valor de referência para comparação foi de $0,044 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, ou seja, houve uma diferença de $0,002 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ entre ambos os valores, o que significa que o valor obtido pelo código desenvolvido foi cerca de 4,55% maior do que o valor de referência.

A Figura 39 mostra o processo de fraturamento de acordo com o nível de carregamento. Nela é possível observar que a fratura começa a se propagar na

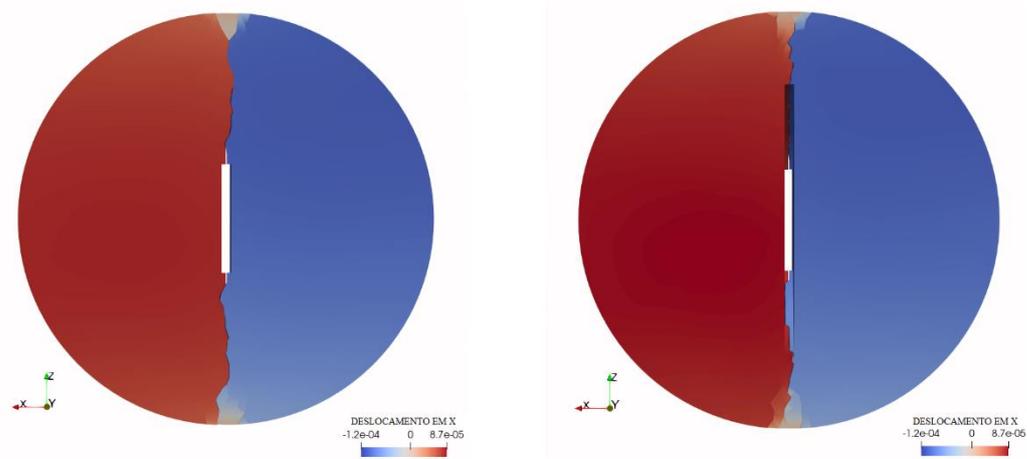
extremidade do entalhe e continua se propagando na direção do carregamento, assim como é visto nesse tipo de ensaio em laboratório.



81% DA FORÇA DE PICO



100% DA FORÇA DE PICO



44% DA FORÇA DE PICO (PÓS-PICO)

Figura 39: Processo de fraturamento do ensaio CCNBD.

6 Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um código numérico tridimensional baseado no método dos elementos finitos e discretos com o intuito de se estudar processos de fraturamento e fragmentação em geomateriais. Foram apresentados detalhes das técnicas utilizadas no desenvolvimento das diversas partes do código, sendo essas partes divididas em modelagem do contínuo, transição do contínuo para o descontínuo, detecção e interação de contatos e resolução das equações de equilíbrio.

O código desenvolvido foi verificado por meio de comparações com resultados publicados na literatura. Para a realização de tais verificações foram simulados três tipos de ensaios de laboratório comumente empregados na área da mecânica das rochas, sendo eles, o ensaio brasileiro, o ensaio de compressão simples e o ensaio de tenacidade à fratura do tipo CCNBD. Além de se analisar a resistência à tração indireta, a resistência à compressão simples e a tenacidade à fratura no modo I, obtidas das simulações, também foram analisados os padrões de fraturamento apresentados pelos modelos. Os valores encontrados pelo código desenvolvido apresentaram uma boa concordância com os valores de referência. Para os ensaios brasileiro, e de tenacidade à fratura, as variações entre ambos os valores foram menores do que 5%, já para os ensaios de compressão simples, as variações foram menores ou iguais a 10%. Ademais, os padrões de fraturamento apresentados pelos modelos numéricos exibiram grande semelhança com os padrões geralmente encontrados em corpos de prova de ensaios de laboratório.

O código aqui desenvolvido, apesar de somente ter sido aplicado a problemas em escala de laboratório, se mostrou apto a reproduzir processos de fraturamento e fragmentação em geomateriais, porém ainda são requeridas verificações em problemas na escala de engenharia.

6.1. Sugestões para trabalhos futuros

Como sugestões para trabalhos futuros propõe-se:

- A realização de verificações em problemas na escala de engenharia;
- A paralelização do código com o intuito de que as simulações sejam executadas de forma mais rápida, facilitando assim a sua aplicação em problemas na escala de engenharia;
- A incorporação de modelos elastoplásticos.

Referências Bibliográficas

BARENBLATT, G. I. The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture. **Advances in Applied Mechanics**, v. 7, p. 55-129, 1962.

CAMANHO, P. P.; TURON, A.; COSTA, J. **Delamination propagation under cyclic loading**. In: Delamination Behaviour of Composites. 1.ed. New York: CRC Press, 2008. p. 485-513.

CAMONES, L. A. M. **Simulação Numérica do Processo de Propagação de Fraturas em Materiais Rochosos em Condições de Acoplamento Fluidomecânico**. Rio de Janeiro, 2015. 139p. Tese de Doutorado - Departamento de Engenharia Civil, PUC-Rio.

CELES, W.; PAULINO, G. H.; ESPINHA, R. A compact adjacency-based topological data structure for finite element mesh representation. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 64, n. 11, p. 1529-1556, set. 2005a.

CELES, W.; PAULINO, G. H.; ESPINHA, R. Efficient handling of implicit entities in reduced mesh representations. **Journal of Computing and Information Science in Engineering**, v. 5, n. 4, p. 348-359, dez. 2005b.

CUNDALL, P. A. A computer model for simulating progressive, large-scale movement in blocky rock systems. **Proceedings of the Symposium of the International Society for Rock Mechanics**, Nancy, v. 1, n. II-8, 1971.

DUGDALE, D. S. Yielding of steel sheets containing slits. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 8, n. 2, p. 100-104, maio 1960.

FIGUEIREDO, R. P. **Aplicação da Técnica de Relaxação Dinâmica à Solução de Problemas Geotécnicos**. Rio de Janeiro, 1991. 204p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil, PUC-Rio.

FOWELL, R. J. International Society for Rock Mechanics commission on testing methods. Suggested method for determining mode I fracture toughness using cracked chevron notched Brazilian disk (CCNBD) specimens. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts**, v. 32, n. 1, p. 57-64, jan. 1995.

FUKUDA, D. et al. Development of a 3D Hybrid Finite-Discrete Element Simulator Based on GPGPU-Parallelized Computation for Modelling Rock Fracturing Under Quasi-Static and Dynamic Loading. **Rock Mechanics and Rock Engineering**, 2019.

GANOVELLI, F.; PONCHIO, F.; ROCCHINI, C. Fast Tetrahedron-Tetrahedron Overlap Algorithm. **Journal of Graphics Tools**, v. 7, n. 2, p. 17-25, 2002.

GUO, H.; AZIZ, N. I.; SCHMIDT, L.C. Rock fracture-toughness determination by the Brazilian test. **Engineering Geology**, v. 33, n. 3, p. 177-188, fev. 1993.

GUO, L. **Development of a three-dimensional fracture model for the combined finite-discrete element method**. London, 2014. 333p. PhD thesis - Department of Earth Science and Engineering, Imperial College London.

HILLERBORG, A.; MODÉER, M.; PETERSSON, P.-E. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. **Cement and Concrete Research**, v. 6, n. 6, p. 773-781, nov. 1976.

IRWIN, G. R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate. **Journal of Applied Mechanics**, v. 24, p. 361-364, 1957.

JING, L. 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, n. 4, p. 283-353, abr. 2003.

JOULIN, C. et al. A New Finite Discrete Element Approach for Heat Transfer in Complex Shaped Multi Bodied Contact Problems. **Proceedings of the 7th International Conference on Discrete Element Methods**, Singapore, 2017.

KARANTZOULIS, N. **Development and implementation of inelastic material models for use in FEMDEM numerical methods with applications**. London, 2017. 249p. PhD thesis – Department of Earth Science and Engineering, Imperial College London.

KLERCK, P. A. **The finite element modelling of discrete fracture in quasi-brittle materials**. Wales, 2000. 262p. PhD thesis - Department of Civil Engineering, University of Wales Swansea.

KLERCK, P. A.; SELLERS, E. J.; OWEN, D. R. J. Discrete fracture in quasi-brittle materials under compressive and tensile stress states. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 27-29, p. 3035-3056, jul. 2004.

KREGTING, R. Cohesive zone models: towards a robust implementation of irreversible behavior. Philips Applied Technologies, 2005.

LEI, Q.; LATHAM, J.-P.; TSANG, C.-F. The use of discrete fracture networks for modelling coupled geomechanical and hydrological behaviour of fractured rocks. **Computers and Geotechnics**, v. 85, p. 151-176, maio 2017.

LISJAK, A. et al. Acceleration of a 2D/3D finite-discrete element code for geomechanical simulations using General Purpose GPU computing. **Computers and Geotechnics**, v. 100, p. 84-96, ago. 2018.

LISJAK, A.; GRASSELLI, G. A review of discrete modeling techniques for fracturing processes in discontinuous rock masses. **Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering**, v. 6, n. 4, p. 301-314, ago. 2014.

LORIG, L. J.; CUNDALL, P. A. Modeling of Reinforced Concrete Using the Distinct Element Method. In: Shah S.P., Swartz S.E. (eds) **Fracture of Concrete and Rock**, New York, NY, Springer, 1989, p. 276-287.

MAHABADI, O. K. et al. Development of a New Fully-Parallel Finite-Discrete Element Code: Irazu. In: **Proceedings of the 50th US rock mechanics/geomechanics symposium**, Houston, Texas, American Rock Mechanics Association, 2016.

MAHABADI, O. K.; LISJAK, A.; MUNJIZA, A.; GRASSELLI, G. Y-Geo: New Combined Finite-Discrete Element Numerical Code for Geomechanical Applications. **International Journal of Geomechanics**, v. 12, n. 6, p. 676-688, dez. 2012.

MOHAMMADNEJAD, M. et al. An overview on advances in computational fracture mechanics of rock. **Geosystem Engineering**, p. 1-24, 2018.

MUNJIZA, A. **The Combined Finite-Discrete Element Method**. 1.ed. England: John Wiley and Sons, Ltd, 2004, 352p.

MUNJIZA, A.; ANDREWS, K. R. F. NBS Contact Detection Algorithm for Bodies of Similar Size. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.43, p. 131-149, dez 1998.

MUNJIZA, A.; ANDREWS, K. R. F. Penalty function method for combined finite-discrete element systems comprising large number of separate bodies. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 49, p. 1377-1396, nov. 2000.

MUNJIZA, A.; KNIGHT, E. E.; ROUGIER, E. **Computational Mechanics of Discontinua**. 1.ed. England: John Wiley and Sons, Ltd, 2011, 267p.

MUNJIZA, A.; OWEN, D.; BICANIC, N. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. **Engineering Computations**, v. 12, n. 2, p. 145-174, feb. 1995.

ORTIZ, M.; PANDOLFI, A. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.44, n. 9, p. 1267-1282, mar. 1999.

PARK, K. **Potential-based fracture mechanics using cohesive zone and virtual internal bond modeling**. Illinois, 2009. 250p. PhD thesis – University of Illinois at Urbana-Champaign.

PARK, K.; PAULINO, G. H. Cohesive Zone Models: A Critical Review of Traction-Separation Relationships Across Fracture Surfaces. **Applied Mechanics Reviews**, v. 64, n. 6, nov. 2011.

PARK, K.; PAULINO, G. H.; ROESLER, J. R. A unified potential-based cohesive model of mixed-mode fracture. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 57, n. 6, p. 891-908, jun. 2009.

PAULINO, G. H. A general topology-based framework for adaptive insertion of cohesive elements in finite element meshes. **Engineering with Computers**, v. 24, n.1 p. 59-78, 2008.

POTYONDY, D. O.; CUNDALL, P. A. A bonded-particle model for rock. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, v. 41, n. 8, p. 1329-1364, dez. 2004.

SMOLJANOVIC, H. et al. Numerical analysis of 3D dry-stone masonry structures by combined finite-discrete element method. **International Journal of Solids and Structures**, v. 136-137, p. 150-167, abr. 2018.

SPRING, D. W.; PAULINO, G. H. A growing library of three-dimensional cohesive elements for use in ABAQUS. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 126, p. 190-216, ago. 2014.

TATONE, B. S. A.; GRASSELLI, G. A calibration procedure for two-dimensional laboratory-scale hybrid finite-discrete element simulations. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, v. 75, p. 56-72, abr. 2015.

TATONE, B. S. A.; GRASSELLI, G. Modeling direct shear test with FEM/DEM: Investigation of discontinuity shear strength scale effect as an emergent characteristic. **American Rock Mechanics Conference**, Chicago, US, 2012.

VYAZMENSKY, A. **Numerical modelling of surface subsidence associated with block cave mining using a finite element / discrete element approach.**

Canada, 2008. 260p. PhD thesis - Simon Fraser University.

XIANG, J.; LATHAM, J.-P.; FARSI, A. Algorithms and Capabilities of Solidity to Simulate Interactions and Packing of Complex Shapes. **Proceedings of the 7th International Conference on Discrete Element Methods**, Singapore, 2017.

XIANG, J.; MUNJIZA, A.; LATHAM, J.-P. Finite strain, finite rotation quadratic tetrahedral element for the combined finite-discrete element method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 79, n. 8, p. 946-978, mar. 2009.