

APLICAÇÃO DE FRATURA COESIVA PARA ANÁLISE DE ESTRUTURAS DE CONCRETO

APPLICATION OF COHESIVE FRACTURE FOR THE ANALYSIS OF CONCRETE STRUCTURES

Rafael N. Cunha^a, Catarina N.A. Fernandes^a, Kycianne R.A.G. Barros^a, Nora N.J.O. Santana^a, Thauany A. Pastor^a, Kevin T.L.M Souza^a, David L.N.F. Amorim^{a,b}

^a Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas, Brasil, rafael.cunha@ctec.ufal.br, <https://ctec.ufal.br/posgraduacao/ppgec/>

^b Instituto de Pesquisa sobre Desastres, Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, Sergipe, Brasil, davidnf@academico.ufs.br, <http://ipd.ufs.br>

Palavras-chave: Análise não-linear; Concreto simples; Mecânica da fratura; Fratura coesiva

Resumo. Este trabalho discute a aplicação de fratura coesiva na análise de estruturas de concreto. A quantificação do processo de fissuração é fundamental para compreensão do comportamento e dos possíveis mecanismos de falha de materiais e estruturas. Uma das teorias que considera estes efeitos é a mecânica da fratura, a qual admite que todos os materiais podem apresentar nucleação e propagação de fissuras. Dentre as abordagens possíveis, modelos de fratura coesiva são uma boa opção para análise de elementos de concreto simples ou reforçado com fibras de aço. Nesse contexto, o objetivo principal do presente estudo consiste em avaliar o modelo de fratura coesiva por meio da análise de diversas estruturas de concreto. Foram investigados aspectos como a influência da posição e espessura da fissura simulada, assim como a energia de fratura associada. Os resultados obtidos revelaram uma notável congruência entre as abordagens numérica e experimental, tanto em relação à carga máxima suportada quanto aos perfis das curvas de Deslocamento vs. Força.

Keywords: Non-linear analysis; Plain concrete; Fracture mechanics; cohesive cracking

Abstract. This paper discusses the application of cohesive fracture in the analysis of concrete structures. Quantification of the cracking process is essential for understanding the behaviour and potential failure mechanisms of materials and structures. One of the theories that considers these effects is fracture mechanics, which assumes that all materials can experience crack initiation and propagation. Among the feasible approaches, cohesive fracture models are a good option for analysing simple concrete elements or those reinforced with steel fibres. In this context, the primary objective of the present study is to evaluate the cohesive fracture model through the analysis of various concrete structures. Aspects such as the influence of simulated crack position and thickness, as well as the associated fracture energy, were investigated. The obtained results revealed a notable congruence between the numerical and experimental approaches, both in terms of the maximum supported load and the profiles of the Displacement vs. Force curves.

1 INTRODUÇÃO

A análise adequada de uma estrutura parte do conhecimento de suas formulações diferenciais, que possuem soluções analíticas disponíveis apenas para casos com condições de contorno e de carregamentos específicos e propriedades dos materiais restritos. Uma das formas de contornar este problema é com o uso de soluções aproximadas, a partir de métodos numéricos, com destaque para o método dos elementos finitos (MEF). A maioria dos sistemas e materiais encontrados na engenharia não exhibe comportamento linear em todas as situações, o que significa que as relações entre as variáveis não podem ser representadas de maneira direta e proporcional. Assim, a consideração da não linearidade física em modelagens numéricas é de extrema importância para garantir a precisão e a confiabilidade dos resultados obtidos, principalmente quando se está investigando estados limites dos materiais e estruturas.

Com o objetivo de avaliar problemas fisicamente não lineares, diversas teorias têm sido propostas ao longo das últimas décadas, com destaque para a teoria da plasticidade, mecânica do dano contínuo e a mecânica da fratura.

A teoria da plasticidade surge com a avaliação do comportamento não linear de materiais dúcteis, como encruamento e deformações permanentes. Esta teoria permite a obtenção de resultados de colapso plástico, entretanto a mesma pode ser aplicada apenas para análises em meios contínuos, ou seja, não permite a modificação do contorno da estrutura durante a análise. A mecânica do dano contínuo foi inicialmente apresentada por Kachanov (1958), a partir da necessidade da modelagem de rupturas lentas. Posteriormente, Lemaitre e Chaboche (1985) propuseram a adição de uma variável interna nas leis de comportamento, denominada dano, a qual é responsável por mensurar o nível de deterioração da estrutura. No entanto, as análises através desta teoria podem levar a formulações mal colocadas, devido ao problema de localização de deformações (Flórez-López et al. 2015). A mecânica da fratura admite que todos os materiais possuem descontinuidades discretas, com ampla utilização para a avaliação de surgimento e propagação de fissuras. Esta teoria surge da necessidade do estudo de colapsos de navios, que não possuíam explicação plausível dentre as teorias conhecidas (Broek, 1974). Os estudos iniciais foram desenvolvidos de forma puramente analítica, para a solução de problemas de chapas infinitas com furos elípticos (Kirsch, 1898; Inglis 1913). Posteriormente, com base nos resultados de Inglis (1913), Griffith (1921, 1924) propôs definir o processo de fratura com base em critérios de energia.

Devido à complexidade de muitos problemas, as soluções analíticas obtidas através da mecânica da fratura passaram a não ser suficientes, sendo necessário a combinação da mesma com métodos numéricos. Cruse e Vanburen (1971) foram os pioneiros neste ramo, com a avaliação das tensões na região próxima a ponta da fissura de uma estrutura tridimensional. Posteriormente, Snyder e Cruse (1975) avaliaram o problema da fratura em um meio anisotrópico, com uma solução baseada nas funções de Green.

Com base no exposto, é de fundamental importância o uso de teorias que consigam modelar estruturas de forma adequada, levando-se em consideração os efeitos não lineares, como o caso de Cordeiro e Leonel (2016) para estruturas de madeira, por Amorim et al. (2018) e Picon et al. (2021) para estruturas de concreto simples e por Rodrigues Neto e Leonel (2019), para bidimensionais não-homogêneos e reforçados.

Neste sentido, o presente trabalho visa avaliar diferentes estruturas de concreto simples e concreto com fibras, com base na mecânica da fratura coesiva. Foram avaliadas 4 diferentes estruturas, levando-se em consideração aspectos como espessura e posição da região coesiva e a energia de fratura.

2 MECÂNICA DA FRATURA COESIVA

Com os avanços científicos, a mecânica da fratura foi desenvolvida com a teoria dos modelos de fissura fictícia. Nestes modelos é admitida a presença de uma fissura fictícia à frente da fissura real existente na estrutura. Estes conceitos iniciais da mecânica da fratura foram desenvolvidos para materiais frágeis, como vidros, o qual obteve nome de Mecânica da Fratura Elástico Linear. Nesta teoria, assume-se a presença de uma Zona de Processos Inelásticos ou Zona de Processos (ZP) à frente da fissura real, que para materiais frágeis possui comprimento desprezável.

Posteriormente foi verificado que para materiais dúcteis e quase frágeis a ZP possuía um comprimento consideravelmente maior. Desta forma, Hillerborg et al. (1976) propôs o desenvolvimento de modelos coesivos para materiais quase frágeis, a partir de simulações numéricas e com validação experimental em corpos de prova de concreto, como apresentado na Figura 1. O desenvolvimento de modelos para avaliação de materiais dúcteis e quase frágeis deu início a chamada Mecânica da Fratura Não Linear.

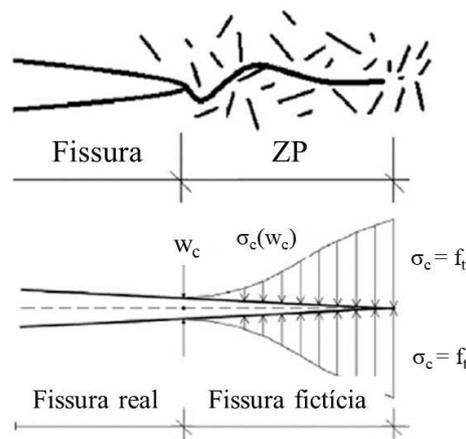


Figura 1. Distribuição de tensões coesivas no modelo de Hillerborg et. al. (1976). Adaptado de Cordeiro e Leonel (2016).

Neste modelo, é verificado que a resistência residual dentro da ZP, é uma função dependente da abertura real da fissura, intitulada de tensão coesiva. Essa tensão representa a resistência residual existente na zona de processos e age buscando fechar as faces da fissura. À medida que o ponto avaliado se aproxima do limite da fissura real, estas tensões coesivas tendem a zero.

O processo de solução de um problema de fratura coesiva se passa por 4 etapas: cálculo do estado de tensão na extremidade da fissura, cálculo do ângulo de propagação da fissura, incremento no comprimento da fissura e processo iterativo para determinar a configuração de equilíbrio. Na primeira etapa, o estado de tensão é calculado através de um processo de extrapolação polinomial, a partir de pontos pré-definidos em uma região dentro do domínio da análise, dado que as tensões são contínuas na vizinhança da fissura. Com base no estado de tensão nos pontos, é definido o estado de tensão na ponta da fissura. Na segunda etapa, o ângulo de propagação da fissura é definido na direção perpendicular à tensão principal atuante na ponta da fissura. O novo comprimento da fissura é calculado na terceira etapa, na qual leva em consideração a lei coesiva do modelo. Dentro desta etapa, é verificado qual o próximo ponto no qual a tensão esteja abaixo do critério de falha definido, utilizando métodos como o da bissecção ou de forma automática, em programas computacionais. Determinados estes três primeiros parâmetros da fratura coesiva, a última etapa consiste em definir um processo

incremental-iterativo que levará a estrutura a uma condição de equilíbrio (LEONEL, 2021).

O programa computacional Abaqus (Abaqus, 2011) permite a modelagem não linear de estruturas, utilizando o modelo de fratura coesiva, com a variação diversos critérios de iniciação e evolução do dano. Dentre os métodos de iniciação de dano, destaca-se o de máxima tensão, máxima deformação específica, tensão nominal quadrática e deformação nominal quadrática. Com relação a evolução do dano o Abaqus permite definir critérios de acordo com o deslocamento máximo ou de acordo com a energia de fratura. No primeiro caso, ao atingir o valor de deslocamento, a falha é completa e finaliza-se a simulação. A energia de fratura pode ser definida como a área abaixo do gráfico tração-separação. Para o segundo critério de evolução do dano, o Abaqus garante que a área abaixo desta curva é igual a energia de fratura inserida pelo usuário como propriedade do material. Além disso, é possível escolher entre diferentes comportamentos de amolecimento no pós-pico, como o linear ou exponencial (ABAQUS, 2011).

3 RESULTADOS

Foram avaliados 4 exemplos obtidos na literatura técnica, os quais possuem resultados experimentais de Força vs. Deslocamento, padrão de fissuração e valores de energia de fratura. As simulações numéricas foram desenvolvidas com o uso do programa computacional Abaqus, utilizando o modelo de fratura coesiva. Como parâmetros internos do modelo, foi utilizado o critério de tensão nominal quadrática, para definir o início da danificação e com a evolução do dano baseada na energia de fratura, utilizando os modelos de amolecimento linear e exponencial.

3.1 Teste de Tração direta

O primeiro exemplo avaliado consiste em um ensaio de tração direta, desenvolvido por Hassanzadeh (1992), com um corpo de prova prismático de concreto simples, cuja geometria é apresentada nas Figura 2(a) e Figura 2(b). Para o referido corpo de prova, tem-se as propriedades físicas de módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, resistência à tração e energia de fratura iguais a 36 GPa, 0,15, 3,5 MPa e 0,05 N/mm, respectivamente.

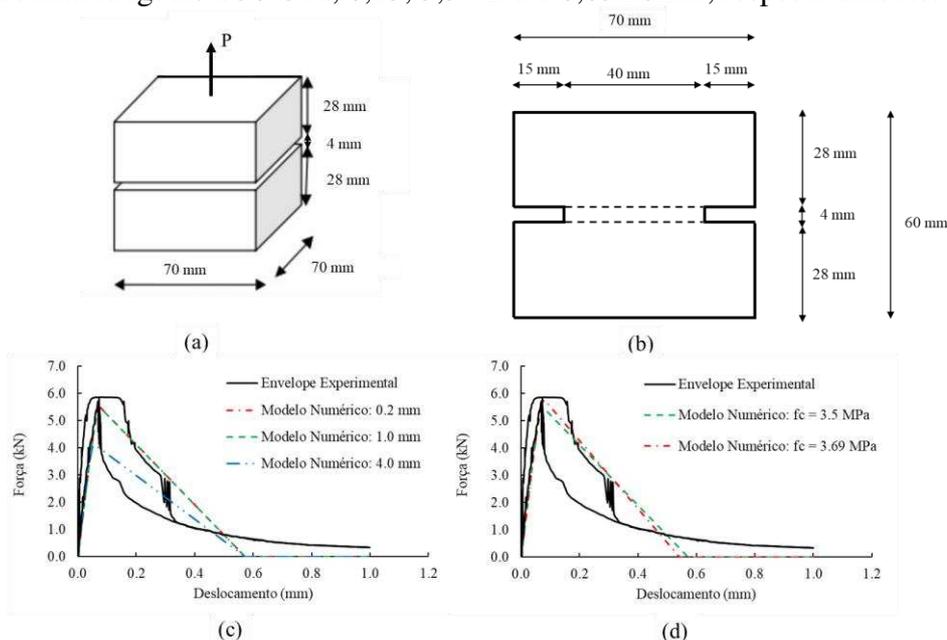


Figura 2. Ensaio de tração direta: (a) e (b) modelo esquemático, (c) Resultados com variação da espessura da zona coesiva e (d) Resultado com ajuste na resistência à tração. Fonte: Adaptado de Hassanzadeh (1992).

O exemplo foi modelado numericamente no programa computacional Abaqus, a face inferior foi fixada, enquanto a superior, tracionada. Dentro da aplicação da fratura coesiva, foram realizadas diferentes simulações considerando 3 variações na espessura da zona coesiva, localizada na região de redução da seção transversal, e uma variação da resistência à tração. O modelo numérico utilizado foi o com amolecimento linear. A Figura 2 (c) apresenta os resultados dos modelos numéricos.

Observa-se uma boa concordância entre os resultados experimentais e o fornecido pela modelagem com o Abaqus. Nas curvas experimentais, observa-se um desvio quando o deslocamento está em torno de 0,03 mm. Hassanzadeh (1992) atribui o desvio à uma assimetria na imposição dos deslocamentos pelo formato em que o aparato experimental foi concebido. Esse tipo de imperfeição não existe em modelagens computacionais, assim o desvio não é observado nos resultados fornecidos pelo Abaqus. É observado que a curva de amolecimento fornecida pelo Abaqus tem o aspecto diferente das curvas experimentais, devido ao uso da lei de amolecimento linear. Foi experimentado elevar o número de incrementos e elevar o refinamento de malha, mas esse aspecto não foi alterado. Outra tentativa foi utilizar a lei de amolecimento exponencial, mas nessa tentativa a simulação foi interrompida pouco tempo após o início do amolecimento devido a problemas de convergência.

Outra tentativa de melhorar a qualidade dos resultados foi experimentar outras espessuras para a região coesiva, além do modelo com 0,2 mm foi simulado um modelo com 1 mm e outro com 4 mm (toda a região de menor espessura). Os resultados obtidos são apresentados na Figura 2(c). Observa-se que a espessura da região coesiva com 1 mm já seria suficiente para o modelo em estudo, porém a consideração da região de redução inteira (espessura de 4 mm) leva a um valor menor de força máxima.

Sobre a diferença entre o pico observado numericamente e experimentalmente na modelagem computacional a resistência à tração do concreto foi definida igual a 3,5 MPa. Considerando que no experimento o valor da força máxima observado foi igual a 5,9 kN e a seção transversal crítica tem 1600 mm², a tensão que provoca a ruptura é aproximadamente 3,69 MPa, valor adotado em uma nova simulação numérica, cujo resultado é apresentado na Figura 2(d). Como esperado, a elevação da resistência à tração aproximou o resultado numérico do experimental. Além disso, é possível observar que, apesar de elevar o pico de força, o deslocamento último foi inferior, em comparação à simulação com resistência à tração de 3,5 MPa, confirmando que o Abaqus busca manter o valor da energia de fratura.

3.2 Ensaio de flexão por 4 pontos

O segundo exemplo trata da flexão de uma viga biapoiada com aplicação de deslocamento prescrito em dois pontos (flexão por 4 pontos), experimentado por Shi et al. (2001), cuja representação esquemática é apresentada na Figura 3(a). Para este exemplo, tem-se as propriedades físicas de módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, resistência à tração e energia de fratura iguais a 27,5 GPa, 0,2, 2,8 MPa e 0,1 N/mm, respectivamente.

Foram desenvolvidos 3 diferentes casos de simulações numéricas, variando a posição e a quantidade de zonas coesivas. Para o caso A foi definida uma zona coesiva exatamente no meio do vão da viga; para o caso B, foi adotada uma zona coesiva embaixo de um dos pontos de aplicação de carga; e no caso C, foram modeladas duas zonas coesivas, uma embaixo de cada ponto de aplicação de carga. A Figura 3(b) apresenta os resultados das respectivas simulações.

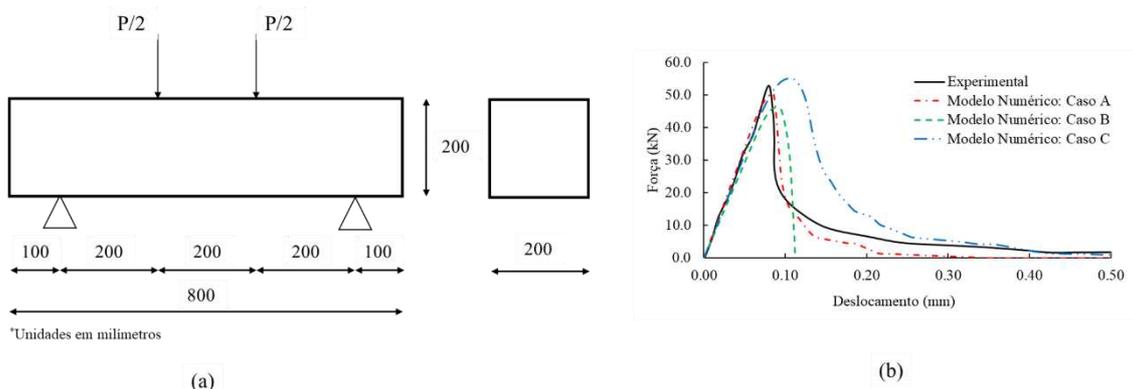


Figura 3. Ensaio de flexão: (a) modelo esquemático e (b) Resultados com variação da posição da fissura coesiva. Fonte: Adaptado de Shi et al. (2001).

É possível observar uma grande coerência entre o caso A e o resultado experimental, desde a proximidade com o pico de força, bem como a região de pós pico. Para o caso B, após o pico e, portanto, início do processo de fissuração, podem ter ocorrido problemas essencialmente numéricos, devido a assimetria do modelo, fazendo com que a simulação tivesse valor de carga totalmente reduzido e sem apresentar um pós-pico coerente com o experimento, independentemente do número de incrementos que fossem utilizados no Abaqus. Por fim, para o caso C, é possível observar que, devido a posição das zonas coesivas, foi necessário um deslocamento maior e uma carga maior para que se iniciasse o processo de fissuração. Este deslocamento do ponto de pico fez com que o pós-pico nesta análise se afastasse do resultado experimental. Portanto, foi possível observar que a definição de uma posição coerente para o desenvolvimento da fissura pode apresentar grande influência nos resultados.

3.3 Chapa em formato de “L”

O terceiro exemplo modelado foi experimentalmente testado por Winkler et al. (2004). Este corpo de prova consiste numa chapa em formato de “L”, com dimensões de 500 mm e 250 mm, com 100 mm de espessura, com carregamento aplicado a 30 mm da borda do elemento, conforme apresentado na Figura 4(a). Para este exemplo, tem-se que as propriedades físicas de módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, resistência à tração e energia de fratura iguais a 28,85 GPa, 0,18, 2,7 MPa e 0,065 N/mm, respectivamente.

Para este exemplo, foi avaliada a influência do formato da zona coesiva, com 2 variações da mesma. No caso A, a zona coesiva é considerada perfeitamente horizontal; no caso B, a fissura busca seguir o formato similar ao observado no experimento (vide Figura 4(b)). A Figura 4(c) apresenta os resultados numéricos obtidos.

É possível observar que ambos os casos avaliados apresentaram boa coerência, comparados com os resultados experimentais de referência. Em específico, a mudança do formato da zona coesiva influenciou de modo que o pico para este caso fosse inferior, ficando dentro do intervalo experimental. No entanto, em ambos os casos, o pico ocorreu antes do observado experimentalmente. Com relação ao trecho de pós-pico, é observado que para os dois cenários avaliados os resultados estão com força e deslocamento inferiores aos observados experimentalmente, possivelmente devido ao valor da energia de fratura informado por Winkler et al. (2004).

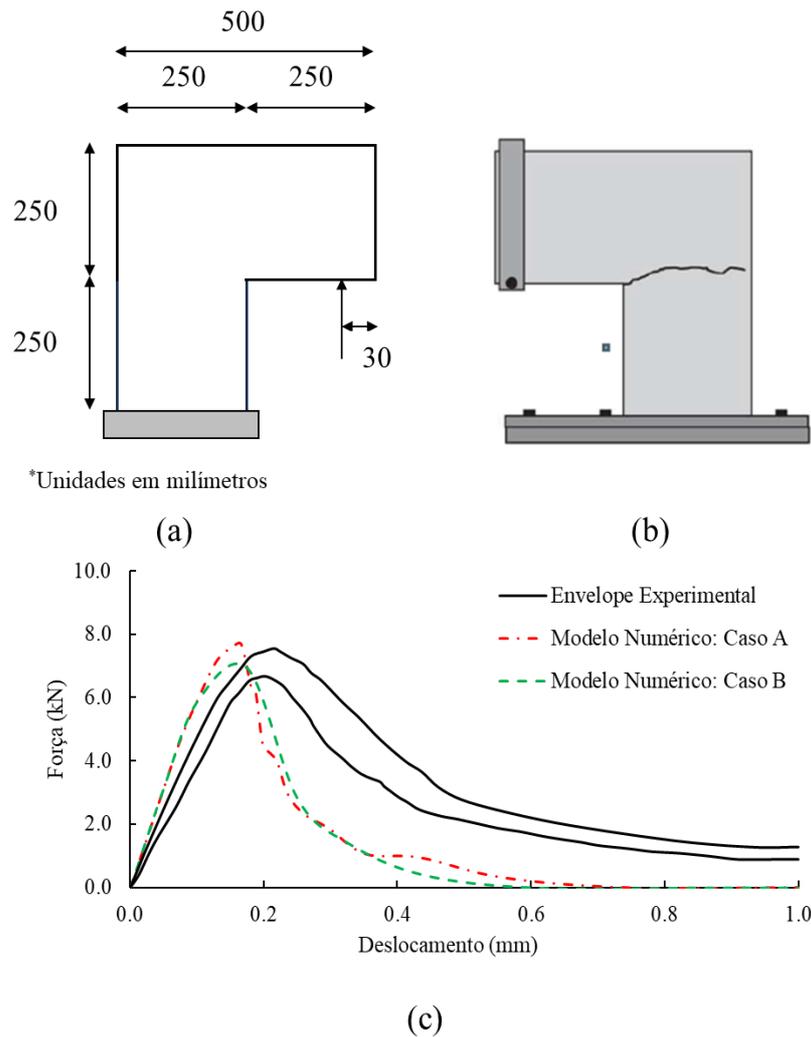


Figura 4. Chapa em L: (a) modelo esquemático, (b) padrão de fissuração experimental e (c) Resultados com variação do formato da fissura. Fonte: Adaptado de Winkler et al. (2004).

3.4 Teste de divisão de cunha

O quarto exemplo a ser avaliado consiste em um ensaio de divisão de cunha, desenvolvido por Trunk (1999), cujo modelo esquemático do ensaio está apresentado na Figura 5(a). Para a simulação numérica, foram adotados os seguintes parâmetros físicos de módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, resistência à tração e energia de fratura iguais a 28,3 GPa, 0,18, 2,9 MPa e 0,29 N/mm, respectivamente.

Os resultados do exemplo são apresentados na Figura 5(b), cuja resposta numérica apresenta forte similaridade com os valores experimentais. Entretanto, é observado um valor de força de pico superior aos ensaios e um pós-pico relativamente afastado do resultado experimental.

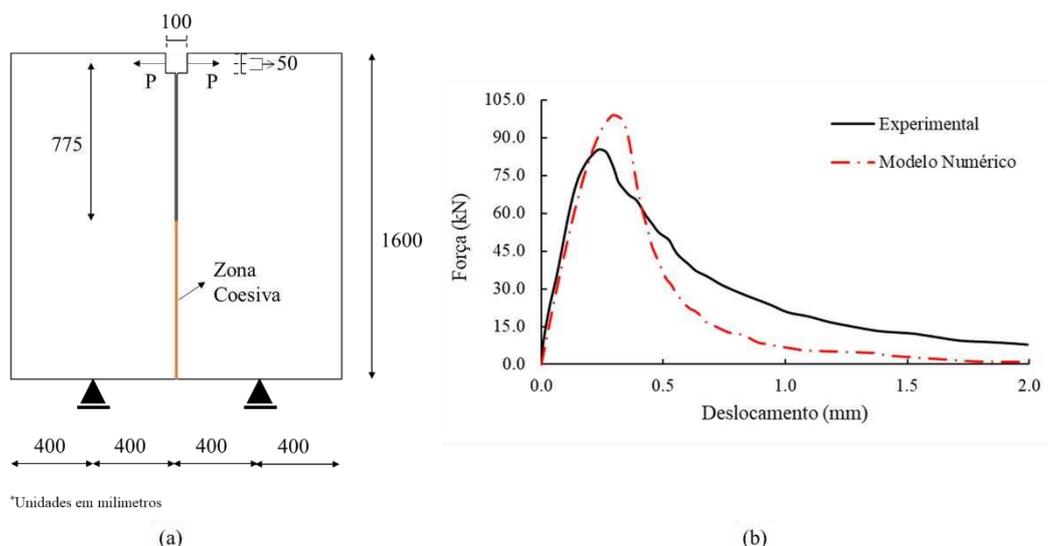


Figura 5. Ensaio de tração direta: (a) modelo esquemático, (b) Resultados do modelo numérico.

4 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como principal objetivo a avaliação de diferentes exemplos experimentalmente ensaiados, sob a ótica da mecânica da fratura, em específico, com a aplicação de modelos coesivos, com o uso do programa computacional Abaqus. Diversas características dos modelos foram avaliadas, como a influência da espessura, posição e quantidade de zonas coesivas, bem como a adoção de diferentes leis de amolecimento.

Foi possível observar que a variação destas propriedades pode influenciar diretamente nos resultados numéricos, sendo necessário a adoção de espessuras para a zona coesiva coerentes com as dimensões do exemplo, bem como a estimativa da posição em que a fissura ocorrerá e irá se propagar. Desta forma, com considerações consistentes, os modelos de fratura coesiva fornecem resultados satisfatórios, em termos de curvas Força vs. Deslocamento, bem como a evolução das fissuras. Uma grande limitação da modelagem numérica via fratura coesiva no Abaqus é a necessidade da definição da região coesiva para modelos não simétricos, como é o caso da chapa em formato de “L”. Por outro lado, a modelagem numérica permite explorar diferentes formatos de estruturas e carregamentos de maneira mais fácil do que em laboratório. Assim, é interessante explorar a modelagem numérica até como um planejamento para ensaios de laboratório, além da previsão do comportamento de estruturas reais que vão trabalhar perto do seu limite de carga.

AGRADECIMENTOS

O primeiro autor agradece a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro durante seu curso de doutorado. Os autores agradecem ao Laboratório de Computação Científica e Visualização (LCCV) da Universidade Federal de Alagoas (UFAL) por ceder acesso à licença do programa computacional Abaqus.

REFERÊNCIAS

- Abaqus. *Abaqus 6.11*. Dassault Systemes Simulia Corporation, Providence, RI, USA, 2011.
- Amorim, D.L., Neto, D.P., Proença, S.P., e Flórez-López J. The extended lumped damage mechanics: A new formulation for the analysis of softening with FE size-independence. *Mechanics Research Communications*, 91, 13-18, 2018.

- <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2018.05.001>.
- Broek, D. *Elementary engineering fracture mechanics*. Martinus Nijhoff, 1 edición, 1974.
- Cordeiro, S.G.F., e Leonel, E.D. Cohesive crack propagation modelling in wood structures using BEM and the Tangent Operator Technique. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 64, p. 111-121, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2015.11.013>.
- Cruse, T.A., e Vanburen, W. Three dimensional Elastic Stress Analysis of Fracture Specimen with an edge Crack. *Int. Journal Mech.* v. 7, p. 7-15, 1971. <https://doi.org/10.1007/BF00236479>.
- Flórez-López, J., Marante, M.E., e Picón, R. *Fracture and damage mechanics for structural engineering of frames: state-of-the-art industrial application*. Hershey, Pennsylvania, USA: IGI Global, 2015. ISBN-13: 978-1466663794.
- Griffith, A.A. The phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, v. 221, p. 163–198, 1921. <https://doi.org/10.1098/rsta.1921.0006>.
- Griffith, A.A. The theory of rupture. In: *First International Congress of Applied Mechanics*. Anais...Delft: 1924.
- Hassanzadeh, M. *Behaviour of fracture process zones in concrete influenced by simultaneously applied normal and shear displacements*. PhD thesis, Division of Building Materials, Lund Institute of Technology, 1992.
- Hillerborg, A., Modéer, M., e Petersson, P.E. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and Concrete Research*, 6 (6) (1976) 773–781. [https://doi.org/10.1016/0008-8846\(76\)90007-7](https://doi.org/10.1016/0008-8846(76)90007-7).
- Inglis, C.E. Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners. *Trans Inst Naval Archit*, 55, 219-241, 1913.
- Kachanov, L. M. Time of the rupture process of non-linear solid mechanics. *Otdeleniye Technicheskikh Nauk*, 8, 28-31, 1958.
- Kirsch, C. Die theorie der elastizität und die bedürfnisse der festigkeitslehre. *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure*, v. 42, p. 797-807, 1898;
- Lemaitre J., e Chaboche J.L. *Mécaniques des matériaux solides*, 1985.
- Leonel, E.D. *Aspectos teóricos da mecânica da fratura*. São Carlos, 2021.
- Picón, R.A., Santos, D.M., Teles, D.V., Amorim, D.L., Zhou, X., Bai, Y., Proença, S.P., e Flórez-López J. Modeling of localization using Nash variational formulations: The extended damage mechanics. *Engineering Fracture Mechanics*, 258:108083, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2021.108083>.
- Rodrigues Neto, A., e Leonel, E.D. The mechanical modelling of nonhomogeneous reinforced structural systems by a coupled BEM formulation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 109, p. 1-18, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2019.09.011>.
- Shi, Z., Ohtsu, M., Suzuki, M., e Hibino, Y. Numerical analysis of multiple cracks in concrete using the discrete approach. *Journal of Structural Engineering*, vol. 127, pp. 1085–1091, 2001. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9445\(2001\)127:9\(1085\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9445(2001)127:9(1085)).
- Snyder, M.D., e Cruse, T.A. Boundary-integral equation analysis of cracked anisotropic plates. *International Journal of Fracture*. v.11, p. 315-328, 1975. <https://doi.org/10.1007/BF00038898>.
- Trunk, B.G. Einfluss der Bauteilgrösse auf die Bruchenergie von Beton. Ph.D. Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Zurich. 1999. <https://doi.org/10.3929/ethz-a-002053523>.
- Winkler, B., Hofstetter, G., e Lehar, H. Application of a constitutive model for concrete to the analysis of a precast segmental tunnel lining. *Int J Numer Anal Meth Geomech*, 28:797-819, 2004. <https://doi.org/10.1002/nag.362>.