

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

MODELAGEM DO COMPORTAMENTO DE ROCHAS NA
ESCALA DE LABORATÓRIO EMPREGANDO O CVBM
HETEROGÊNEO

JAIR OCHOA VALDERRAMA

ORIENTADOR: ANDRÉ PACHECO DE ASSIS, PhD
CO-ORIENTADOR: LEANDRO LIMA RASMUSSEN, DSc

TESE DE DOUTORADO EM GEOTECNIA
PUBLICAÇÃO: G.TD-192/2023

BRASÍLIA/DF: OUTUBRO/2023

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL

**MODELAGEM DO COMPORTAMENTO DE ROCHAS NA
ESCALA DE LABORATÓRIO EMPREGANDO O CVBM
HETEROGÊNEO**

JAIR OCHOA VALDERRAMA

**TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
CIVIL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR.**

APROVADA POR:

ANDRÉ PACHECO DE ASSIS, PhD (ENC, UnB)
(ORIENTADOR)

LEANDRO LIMA RASMUSSEN, DSc (ENC, UnB)
(CO-ORIENTADOR)

MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, PhD (ENC, UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)

CARLOS ALBERTO LAURO VARGAS, DSc (EECA, UFG)
(EXAMINADOR EXTERNO)

PEDRO PAZZOTO CACCIARI, DSc (École Polytechnique de Montréal - EPM)
(EXAMINADOR EXTERNO)

DATA: BRASÍLIA/DF, 4 de outubro de 2023.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM GEOTECNIA

Ata Nº: 24

Aos quatro dias do mês de outubro do ano de dois mil vinte e três, às 09h:00min, no Programa de Pós-Graduação em Geotecnia, instalou-se a banca examinadora de tese de doutorado do(a) aluno(a) Jair Ochoa Valderrama. A banca examinadora foi composta pelos professores Dr. Pedro Pazzoto Cacciari, École Polytechnique de Montréal - EPM, e Dr. Carlos Alberto Lauro Vargas, UFG, examinadores externos, Dr. Márcio Muniz de Farias, UnB, examinador interno, e Dr. André Pacheco de Assis, UnB, orientador. O discente apresentou o trabalho intitulado "Modelagem do comportamento de rochas na escala de laboratório empregando o CVBM heterogêneo".

Concluída a exposição, procedeu-se a arguição do(a) candidato(a), e após as considerações dos examinadores o resultado da avaliação do trabalho foi:

- Pela aprovação do trabalho;
- Pela aprovação do trabalho, com revisão de forma, indicando o prazo de até 30 dias para apresentação definitiva do trabalho revisado;
- Pela reformulação do trabalho, indicando o prazo de (Nº DE MESES) para nova versão;
- Pela reprovação do trabalho, conforme as normas vigentes na Universidade de Brasília.

Conforme os Artigos 34, 39 e 40 da Resolução 0080/2021 - CEPE, o(a) candidato(a) não terá o título se não cumprir as exigências acima.

Dr. Pedro Pazzoto Cacciari, EPM
Examinador externo

Dr. Carlos Alberto Lauro Vargas, UFG
Examinador externo

Dr. Márcio Muniz de Farias, UnB
Examinador interno

Dr. André Pacheco de Assis, UnB
Orientador

Jair Ochoa Valderrama
Doutorando



Documento assinado eletronicamente por **Andre Pacheco de Assis**,
Professor(a) de Magistério Superior da Faculdade de Tecnologia, em
04/10/2023, às 13:24, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento na
Instrução da Reitoria 0003/2016 da Universidade de Brasília. 111



Documento assinado eletronicamente por **CARLOS ALBERTO LAURO VARGAS, Usuário Externo**, em 04/10/2023, às 16:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento na Instrução da Reitoria 0003/2016 da Universidade de Brasília.



Documento assinado eletronicamente por **Pedro Pazzoto Cacciari, Usuário Externo**, em 04/10/2023, às 16:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento na Instrução da Reitoria 0003/2016 da Universidade de Brasília.



Documento assinado eletronicamente por **Marcio Muniz de Farias, Professor(a) de Magistério Superior da Faculdade de Tecnologia**, em 05/10/2023, às 15:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento na Instrução da Reitoria 0003/2016 da Universidade de Brasília.



Documento assinado eletronicamente por **Jair Ochoa Valderrama, Usuário Externo**, em 11/10/2023, às 12:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento na Instrução da Reitoria 0003/2016 da Universidade de Brasília.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.unb.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **10374007** e o código CRC **5AC157EB**.

FICHA CATALOGRÁFICA

VALDERRAMA, JAIR OCHOA

Modelagem do Comportamento de Rochas na Escala de Laboratório Empregando o CVBM Heterogêneo.

[Distrito Federal] 2023

xxiii,136p., 210x297 mm (ENC/FT/UnB, Doutor, Geotecnia, 2023)

Tese de Doutorado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental

1. Heterogeneidade Interna da Rocha

2. Modelo Contínuo de Blocos Voronoi

3. Modelagem Numérica

4. Tensões características

I. ENC/FT/UNB

II. Doutor

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

VALDERRAMA, J.O. (2023). Modelagem do Comportamento de Rochas na Escala de Laboratório Empregando o CVBM Heterogêneo. Tese de Doutorado, Publicação G.TD-192/2023, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 136p.

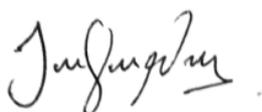
CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Jair Ochoa Valderrama.

TÍTULO DA TESE DE DOUTORADO: Modelagem do Comportamento de Rochas na Escala de Laboratório Empregando o CVBM Heterogêneo.

GRAU / ANO: Doutor / 2023.

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



Jair Ochoa Valderrama

E-mail: jaircivil25@hotmail.com

DEDICATÓRIA

A mi padre Edgar y a mi madre Marie,
gratitud y admiración.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela saúde que tem me outorgado para aproveitar todas as oportunidades que têm-se me apresentado no meu caminho e por me acompanhar e proteger sempre.

Aos meus pais Marie e Edgar, por todos os seus ensinamentos para me virar na melhor versão que eu posso ser e pelo apoio incondicional em todas as minhas decisões. Aos meus irmãos Elizabeth, Jeider e Catalina, pelo seu acompanhamento desde a infância.

A minha namorada Andrea, pela paciência, ajuda, apoio e carinho durante esta etapa de doutorado e nos momentos difíceis, por compartilhar uma parte do seu coração comigo, por me permitir caminhar a seu lado e por confiar em mim, admiro muito tua entrega, coragem e disposição. Obrigado amor.

Ao meu orientador, o professor André Assis, pela confiança depositada em mim, sua humildade e seu apoio constante, minha admiração e gratidão total. Ao meu co-orientador, o professor Leandro, pela sua excelente disposição e constante interesse nesta pesquisa.

Aos membros da banca examinadora, por seus apontamentos e sugestões construtivas.

Ao Programa de Pós-Graduação em Geotecnia da Universidade de Brasília, por me dar todo o conhecimento adquirido ao longo do mestrado e doutorado, assim como também, aos professores que compartilharam parte da sua sabedoria conosco.

Às instituições de fomento CAPES e FAP-DF pelo apoio econômico durante o desenvolvimento desta pesquisa.

E por último, agradeço a todos aqueles com os quais comparti diferentes momentos durante o meu doutorado e que enriqueceram, de alguma ou outra forma, esta experiência.

MODELAGEM DO COMPORTAMENTO DE ROCHAS NA ESCALA DE LABORATÓRIO EMPREGANDO O CVBM HETEROGÊNEO

RESUMO

Com o aumento da demanda de obras projetadas no espaço subterrâneo, tem se apresentado a necessidade de compreender e prever o comportamento das rochas quando submetidas a diferentes tipos de carregamentos externos. Múltiplas técnicas experimentais e numéricas têm sido desenvolvidas para representar os diversos fenômenos que envolvem as rochas e os maciços rochosos. Uma dessas técnicas é o Modelo Contínuo de Blocos Voronoi (CVBM), que, com sua abordagem pseudo-descontínua bidimensional, tem-se mostrado como uma ferramenta numérica capaz de simular o comportamento das rochas na escala de campo e de laboratório, assumindo um único tipo de material para o conjunto de blocos e juntas utilizados na sua representação. No entanto, nos últimos anos, reconheceu-se a contribuição de outras fontes de heterogeneidade para uma modelagem mais precisa das rochas, permitindo modos de falha mais realistas e um desenvolvimento das tensões macroscópicas mais próximo dos resultados experimentais. Por estes motivos, neste trabalho, a heterogeneidade de material e de contato foi integrada ao CVBM usando um *script* desenvolvido na linguagem Python. Como caso de estudo, foi representado o comportamento do Diorito Äspö quando submetido a diferentes tipos de ensaios de laboratório (compressão simples e confinada, tração indireta, carregamento cíclico e tenacidade de fratura), analisando o impacto dos diferentes parâmetros, do tamanho dos elementos constituintes e da variabilidade espacial e estrutural na resposta elástica, tensões características e resistências do modelo. O CVBM heterogêneo conseguiu simular adequadamente a resposta macroscópica da rocha, capturando a variabilidade natural dos resultados e o desenvolvimento de diferentes tipos de fraturas ao longo do processo de carregamento. As novas características adicionadas ao modelo resultaram no rápido desenvolvimento de tensões de tração dentro do material, causando o crescimento gradual das fraturas, impactando nas tensões características e no comprimento da zona de crescimento instável das fraturas. Além disso, são expostos os procedimentos seguidos para representar o comportamento de rochas que apresentam foliação ou inclusões na sua estrutura interna, utilizando como exemplos ilustrativos a alteração do diorito calibrado e o basalto amigdalóide encontrado no local de construção da usina hidrelétrica de Baihetan, na China. Por fim, o trabalho é concluído com a expansão do procedimento para a aplicação da abordagem probabilística na definição das propriedades ao interior do corpo de prova.

SIMULATION OF ROCK BEHAVIOR AT LABORATORY SCALE USING THE HETEROGENEOUS CVBM

ABSTRACT

With the increasing demand for underground construction projects, there has been a growing need to understand and predict the behavior of rocks when subjected to different types of external loads. Multiple experimental and numerical techniques have been developed to represent the various phenomena involving rocks and rock masses. One of these techniques is the Continuum Voronoi Block Model (CVBM), which, with its two-dimensional pseudo-discontinuous approach, has proven to be a numerical tool capable of simulating rock behavior on both field and laboratory scales, assuming a single material for the entire set of blocks and joints used in its representation. However, in recent years, the contribution of other sources of heterogeneity for a more accurate modeling of rocks has been recognized, allowing for more realistic failure modes and a development of macroscopic stresses closer to laboratory results. For these reasons, in this work, material and contact heterogeneity were integrated into the CVBM using a script developed in the Python language. As a case study, the behavior of Äspö diorite was represented when subjected to different types of laboratory tests (simple and confined compression, indirect tension, cyclic loading, and fracture toughness), analyzing the impact of different parameters, the size of constituent elements, and spatial and structural variability on elastic response, characteristic stresses, and model strengths. The heterogeneous CVBM adequately simulated the rock's macroscopic response, capturing the natural variability of the results and the development of different types of fractures throughout the loading process. The new features added to the model resulted in early development of tensile stresses within the material, causing the gradual growth of fractures, impacting characteristic stresses and the extent of the unstable fracture growth zone. Additionally, the procedures followed to represent the behavior of rocks that exhibit foliation or inclusions in their internal structure are presented, taking as illustrative examples the alteration of calibrated diorite and the amygdaloid basalt found at the construction site of the Baihetan Hydroelectric Power Station in China, respectively. The work concludes with the extension of the procedure to the application of a probabilistic approach for defining properties within the sample.

SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LAS ROCAS EM ESCALA DE LABORATORIO USANDO EL MODELO CONTINUO DE BLOQUES VORONOI HETEROGÉNEO

RESUMEN

Con la creciente demanda de obras desarrolladas en el espacio subterráneo se ha visto la necesidad de entender y predecir el comportamiento de las rocas cuando sometidas a diferentes tipos de cargas externas. Diversas técnicas experimentales y numéricas han sido desarrolladas para representar varios de los fenómenos que envuelven las rocas y los macizos rocosos. Una de esas técnicas es el Modelo Continuo de Bloques Voronoi (CVBM), que con su abordaje pseudo-discontinua bidimensional se ha mostrado como una herramienta numérica capaz de simular el comportamiento de las rocas en la escala de campo y laboratorio, asumiendo un único material para el conjunto de bloques y juntas usados en su representación. No obstante, en los últimos años ha sido reconocida la contribución de otras fuentes de heterogeneidad para un modelado más aproximado de las rocas, permitiendo obtener modos de ruptura más realistas y un desarrollo de las tensiones macroscópicas más cercano al registrado en laboratorio. Por estos motivos, en este trabajo fue integrada la heterogeneidad material y de contactos al CVBM mediante un *script* desarrollado en el lenguaje Python. Como caso de estudio, fue representado el comportamiento de la diorita Äspö cuando sometida a diferentes tipos de ensayos de laboratorio (compresión simple y confinada, tracción indirecta, carga cíclica y tenacidad de fractura), analizando el impacto de los diferentes parámetros, del tamaño de los elementos constituyentes y de la variabilidad espacial y estructural en la respuesta elástica, tensiones características y resistencias del modelo. El CVBM heterogéneo consiguió simular adecuadamente la respuesta macroscópica de la roca, capturando la variabilidad natural de los resultados y el desenvolvimiento de los diferentes tipos de fractura a lo largo del proceso de carga. Las nuevas características adicionadas al modelo provocaron un desarrollo temprano de las tensiones de tracción al interior del material, ocasionando el crecimiento gradual de las fracturas, impactando en las tensiones características y en la extensión de la zona de crecimiento inestable de fracturas. Adicionalmente, se muestran los procedimientos seguidos para representar el comportamiento de rocas que presentan foliación o inclusiones en su estructura interna, tomando como ejemplo ilustrativo la alteración de la diorita calibrada y el basalto amigdaloides presente en el lugar de construcción de la hidroeléctrica de Baihetan (China), respectivamente. El trabajo culmina con la extensión del procedimiento a la aplicación del enfoque probabilístico para la definición de las propiedades al interior del cuerpo de prueba.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1.	APRESENTAÇÃO	1
1.2.	MOTIVAÇÃO	3
1.3.	OBJETIVOS	4
1.4.	ORGANIZAÇÃO DA TESE	5
2.	COMPORTAMENTO DAS ROCHA EM LABORATÓRIO E HETEROGENEIDADE NA ESCALA DOS MINERAIS	7
2.1.	DESCRIÇÃO DO COMPORTAMENTO E FRATURAMENTO DE ROCHAS EM LABORATÓRIO	8
2.2.	FONTES DA HETEROGENEIDADE INTERNA NAS ROCHAS	12
2.3.	REPRESENTAÇÃO NUMÉRICA DAS ROCHAS CONSIDERANDO A HETEROGENEIDADE INTERNA	13
3.	MODELO CONTÍNUO DE BLOCOS VORONOI HETEROGÊNEO	17
3.1.	CVBM (<i>CONTINUUM VORONOI BLOCK MODEL</i>)	17
3.2.	PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS ELEMENTOS DO CVBM	19
3.3.	INTEGRAÇÃO DE OUTRAS FONTES DE HETEROGENEIDADE NO CVBM	21
3.4.	HIPÓTESES DO CVBM HETEROGÊNEO.....	22
4.	MODELAGEM DE ROCHAS NAS CONDIÇÕES DE CARREGAMENTO UCS E BTS.....	25
4.1.	PROCEDIMENTO DE CALIBRAÇÃO	25
4.2.	ENSAIOS DE LABORATÓRIO DO DIORITO ÄSPÖ	26
4.3.	GERAÇÃO DOS MODELOS	29
4.4.	RESULTADOS.....	33
4.4.1.	Parâmetros relevantes no processo de calibração	33
4.4.2.	Resultados da calibração	39
4.4.3.	Análises complementários.....	46
4.5.	CONCLUSÕES PARCIAIS	50
5.	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS TAMANHOS DOS ELEMENTOS	53
5.1.	EFEITO DO TAMANHO DOS BLOCOS VORONOI	53
5.2.	EFEITO DO TAMANHO DO CORPO DE PROVA.....	56
5.3.	EFEITO DO TAMANHO DOS ELEMENTOS INTERNOS	57
5.4.	CONCLUSÕES PARCIAIS	59

6.	CVBM CONVENCIONAL VS CVBM HETEROGÊNEO	60
6.1.	CVBM CONVENCIONAL EQUIVALENTE	61
6.2.	CVBM CONVENCIONAL CALIBRADO.....	65
6.3.	CONCLUSÕES PARCIAIS	68
7.	VARIABILIDADE ESPACIAL E ESTRUTURAL	69
7.1.	CRIAÇÃO DOS MODELOS	69
7.2.	RESULTADOS E ANÁLISE ESTATÍSTICA.....	70
7.3.	CONCLUSÕES PARCIAIS	73
8.	MODELAGEM DO ENSAIO DE COMPRESSÃO CONFINADA	75
8.1.	ENSAIOS DE COMPRESSÃO CONFINADA COM A CALIBRAÇÃO INICIAL	75
8.2.	ENSAIOS DE COMPRESSÃO CONFINADA COM A CALIBRAÇÃO AJUSTADA	78
8.3.	VARIABILIDADE ESTRUTURAL NOS MODELOS DE COMPRESSÃO CONFINADA	83
8.4.	CONCLUSÕES PARCIAIS	84
9.	APLICAÇÕES ADICIONAIS DO CVBM HETEROGÊNEO	86
9.1.	CARREGAMENTO CÍCLICO	86
9.2.	ENSAIOS DE TENACIDADE DA FRATURA	89
9.3.	ANÁLISE DE ROCHAS ANISOTRÓPICAS E AMIGDALOIDES	92
9.4.	ABORDAGEM PROBABILÍSTICA DA HETEROGENEIDADE INTERNA.....	98
9.5.	CONCLUSÕES PARCIAIS	101
10.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	102
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	105
	ANEXOS.....	115
A.	CÓDIGO PYTHON	115
B.	RESULTADOS DAS ANÁLISES DE VARIABILIDADE	126
C.	CÓDIGO PYTHON (ABORDAGEM PROBABILÍSTICA).....	128

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1. Parâmetros que definem o comportamento das entidades que integram o CVBM.	20
Tabela 3.2. Pseudo-código do <i>script</i> usado para introduzir a heterogeneidade material e de contatos no CVBM.	22
Tabela 4.1. Parâmetros elásticos e tensões características do ensaio de compressão não confinada. Valores obtidos de Nordlund <i>et al.</i> (1999) e Staub <i>et al.</i> (2004).	28
Tabela 4.2. Composição mineralógica do Diorito Äspö reportada por Lampinen (2006).	28
Tabela 4.3. Composição mineralógica adotada nos modelos numéricos do Diorito Äspö.	30
Tabela 4.4. Parâmetros de elasticidade dos minerais considerados inicialmente nos modelos segundo Bass (1995) e Batzle <i>et al.</i> (2006).	32
Tabela 4.5. Parâmetros elásticos calibrados para os blocos Voronoi.	40
Tabela 4.6. Parâmetros de resistência calibrados com base nos modelos UCS e BTS.	40
Tabela 4.7. Parâmetros elásticos calibrados para as juntas.	41
Tabela 4.8. Parâmetros macroscópicos dos modelos para ambas as calibrações.	42
Tabela 4.9. Rigidez normal das juntas considerando diferentes métodos de cálculo.	47
Tabela 4.10. Efeito do método de cálculo de k_n^{ij} nos parâmetros macroscópicos do modelo.	48
Tabela 6.1. Parâmetros usados no CVBM convencional equivalente.	62
Tabela 6.2. Propriedades do CVBM convencional calibradas para representar o comportamento do Diorito Äspö.	67
Tabela 6.3. Propriedades macroscópicas dos modelos calibrados para as duas variantes do CVBM consideradas.	68
Tabela 7.1. Análise estatística do efeito da variabilidade espacial e estrutural na resposta macroscópica do modelo, comparada com os valores médios experimentais reportados por Nordlund <i>et al.</i> (1999) e Andersson (2007).	72
Tabela 8.1. Parâmetros de resistência calibrados para os blocos Voronoi e as juntas com base nos modelos de tração indireta, compressão confinada e não confinada.	80
Tabela 8.2. Tensões características e máximas médias para ambos os conjuntos de parâmetros de calibração.	83
Tabela 9.1. Parâmetros usados na modelagem do basalto amigdalóide.	98
Tabela 9.2. Distribuições que podem ser utilizadas na abordagem probabilística do modelo.	99
Tabela B.1. Parâmetros macroscópicos obtidos das modelagens aplicando a variabilidade espacial dos minerais.	126

Tabela B.2 Parâmetros macroscópicos obtidos das modelagens aplicando a variabilidade estrutural dos blocos Voronoi.....	127
---	-----

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. a) Imagem de lâmina delgada de um Gnaisse. Modificado de D. Li <i>et al.</i> (2022) b) Frente da escavação do túnel Xiaosanxia na China. Modificado de Qiu <i>et al.</i> (2021)....	1
Figura 1.2. Exemplos de aplicação do CVBM na área da mecânica das rochas: ensaios de compressão em amostras de rocha intacta e degradada a) (Rógenes <i>et al.</i> , 2022) e b) (Y. Li & Bahrani, 2021a), análise da ruptura de pilares sob compressão e cisalhamento c) (Hamediazad & Bahrani, 2022) e d) (Rógenes <i>et al.</i> , 2023), modelagem de ruptura de túneis e) (Sanipour <i>et al.</i> , 2022) e f) (Rógenes, 2021).....	4
Figura 2.1. Número de pesquisas por ano indexadas no site Scopus (Elsevier, 2023) que possuem no título, resumo ou palavras chaves os termos “rock”, “heterogeneity” ou “heterogeneous”, e “laboratory”.....	7
Figura 2.2. Esquema da curva tensão-deformação em condição de compressão com as regiões ou zonas com comportamento diferenciado. Modificado de Hoek & Martin (2014).....	9
Figura 2.3. Representação das rochas tipo I e II respeito ao comportamento pós-pico. Adaptado de Wawersik & Fairhurst (1970).	11
Figura 2.4. Microfotografias em luz polarizada da estrutura mineralógica das rochas exemplificando a) a variabilidade na forma, tipo y tamanho dos minerais, b) a orientação preferencial dos minerais e c) a presença de microfaturas. Adaptado de Passchier & Trouw (2005).	13
Figura 2.5. Modelos FDEM de ensaio BTS empregando a) distribuição de probabilidade (Modificado de Feng <i>et al.</i> (2019)) e b) processamento de imagem (Adaptado de Mahabadi <i>et al.</i> (2014)).	14
Figura 2.6. Geração do modelo numérico a) considerando o conteúdo mineralógico (Modificado de Sinha & Walton (2020a)) e b) por meio do método de sintetização da textura (Modificado de Xiao <i>et al.</i> (2021)).....	15
Figura 3.1. a) Microfotografia em luz polarizada do granito Hwangdeung e b) a sua representação numérica empregando polígonos Voronoi. Adaptado de Park <i>et al.</i> (2017). c) Elementos que conformam o diagrama de Voronoi formado a partir da nuvem de pontos de controle ou sementes. Modificado de Abdelaziz <i>et al.</i> (2018).....	18
Figura 3.2. Entidades que compõem o modelo CVBM.	19
Figura 3.3. Comportamento elástico-frágil-plástico usado nos elementos internos e nos elementos de junta de Goodman.....	20
Figura 3.4. Definição de a) junta aberta e b) junta fechada para o CVBM no <i>software</i> RS2. .	21

Figura 4.1. Diagrama de fluxo do processo de calibração do CVBM heterogêneo considerando as condições de carregamento UCS e BTS.....	26
Figura 4.2. a) Amostra U626 de Diorito Äspö, destacando-se as fraturas acontecidas durante o ensaio UCS. Modificado de Staub <i>et al.</i> (2004). b) Fotografia em luz polarizada do Diorito Äspö, a largura da imagem equivale a 4 mm. Adaptado de Lampinen (2006).	27
Figura 4.3. Resultados do ensaio UCS para a amostra U626 de Diorito Äspö, a) curva tensão-deformação (Adaptado de Staub <i>et al.</i> (2004)) e b) curvas deformações volumétricas-deformação axial.....	27
Figura 4.4. Faixa granulométrica para o Diorito Äspö. Digitalizado de Lan <i>et al.</i> (2010).	28
Figura 4.5. Corpos de prova gerados para a Calibração 1, a) modelo do ensaio UCS e b) modelo do ensaio BTS. c) Detalhe dos elementos internos que conformam os blocos Voronoi.	30
Figura 4.6. Distribuições granulométricas dos modelos UCS usados na representação do Diorito Äspö.	31
Figura 4.7. Módulo de Young inicial macroscópico em função do parâmetro α e da relação k_n/k_s . O valor de referência se mostra com uma banda erro de $\pm 5\%$	34
Figura 4.8. Coeficiente de Poisson inicial macroscópico em função do parâmetro α e da relação k_n/k_s . O valor de referência se mostra com uma banda erro de $\pm 5\%$	34
Figura 4.9. Comportamento elástico das curvas tensão-deformação com o aumento de α para diferentes valores de k_n/k_s . a) $k_n/k_s = 0,1$, b) $k_n/k_s = 1$, c) $k_n/k_s = 5$	35
Figura 4.10. Envoltórias de ruptura de M-C geradas na análise do efeito de c_v , c_j e T_v (linhas cinzas), e usadas no modelo calibrado (linhas pretas).	37
Figura 4.11. Efeito dos parâmetros c_v , T_v e c_j nas tensões características do ensaio de compressão simples.	37
Figura 4.12. Efeito do fator de redução de ν_v na resposta elástica dos modelos UCS.	39
Figura 4.13. a) Influência do fator de redução de ν_v nas tensões dos modelos. b) Tensões de tração desenvolvidas nas amostras com diferentes valores do fator de redução para o estágio 30 ($\epsilon_a=0,23\%$).	39
Figura 4.14. a) Curva tensão-deformação e b) curvas de deformação volumétrica total e das fraturas para ambas as tentativas de calibração, comparadas com o resultado experimental.....	41
Figura 4.15. Curvas tensão de tração-deslocamento para os dois modelos BTS.	42
Figura 4.16. a) Processo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 1 mostrando os estágios CI, CD, UCS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.....	43

Figura 4.17. a) Processo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 2 mostrando os estágios CI, CD, UCS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.....	44
Figura 4.18. a) Processo de fraturamento do modelo BTS para a Calibração 1 e 2 mostrando os estágios BTS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.....	45
Figura 4.19. Influência do método de cálculo de k_n^{ij} na a) curva tensão-deformação e no b) tipo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 1.	47
Figura 4.20. Influência do método de cálculo de k_n^{ij} na quantidade de a) elementos internos e b) elementos de junta plastificados para o modelo de compressão simples.	49
Figura 4.21. Análise do problema de mal condicionamento para os modelos da Calibração 1. a) Modelo de compressão simples e b) modelo de tração indireta.	49
Figura 4.22. Plastificação das amostras na análise do problema de mal condicionamento. Estágios a) UCS e b) Pós-pico para o modelo UCS. c) Estágio Pós-pico para o modelo BTS.	50
Figura 5.1. Modelos do ensaio BTS para diferentes valores de $\bar{l}_j/\bar{l}_j^{ref}$: a) 0,5, b) 1, c) 2 e d) 3.54	
Figura 5.2. Efeito do tamanho dos blocos na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.....	55
Figura 5.3. Corpos de prova na condição pós-pico considerando diferentes valores de $\bar{l}_j/\bar{l}_j^{ref}$. a) Modelos UCS, b) modelos BTS.	55
Figura 5.4. Efeito do tamanho da amostra na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.....	56
Figura 5.5. a) Alterações do conteúdo mineralógico dos modelos com a mudança no tamanho da amostra (P – Plagioclásio, F – K-Feldspato, Q – Quartzo, BC – Biotita/Clorita). b) Corpos de prova na condição pós-pico para diferentes valores do fator de escala.....	57
Figura 5.6. Influência da densidade da malha na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.....	58
Figura 5.7. Corpos de prova na condição pós-pico para diferentes valores de \bar{l}_j/\bar{l}_m . a) Modelos UCS, b) modelos BTS.	59
Figura 6.1. Resultados dos modelos de a) compressão simples e b) tração indireta empregando o CVBM heterogêneo (Calibração 1) e o CVBM convencional equivalente.....	62
Figura 6.2. Processo de fraturamento acontecido nos modelos UCS e BTS para ambas as versões do CVBM analisadas.	63

Figura 6.3. Comparativa das tensões de tração desenvolvidas na região central do corpo de prova para as duas variantes do CVBM.....	64
Figura 6.4. Desvio das tensões verticais medidas ao longo da largura A-B com relação ao valor médio para as duas versões do CVBM empregadas.	65
Figura 6.5. a) Módulo de Young e b) coeficiente de Poisson iniciais macroscópicos em função do parâmetro α , da relação k_n/k_s e do módulo E_v para o CVBM convencional.	66
Figura 6.6. Comparativa entre o CVBM convencional e o CVBM heterogêneo calibrados para representar o comportamento do Diorito Äspö. Resultados dos modelos a) UCS e b) BTS, e c) tipo de fraturamento do modelo convencional.....	67
Figura 7.1. Exemplo de modelos UCS aplicando variabilidade espacial e estrutural.....	70
Figura 7.2. Curvas tensão-deformação para as simulações do ensaio UCS considerando a) a variabilidade espacial e b) a variabilidade estrutural. Linhas tracejadas representam as curvas máximas e mínimas experimentais obtidas por (Staub <i>et al.</i> , 2004).....	71
Figura 7.3. Curvas tensão-deslocamento para as simulações do ensaio BTS considerando a) a variabilidade espacial e b) a variabilidade estrutural.....	71
Figura 7.4. Faixas das a) propriedades de deformabilidade e b) das tensões macroscópicas dos modelos com variabilidade espacial e estrutural comparadas com as faixas experimentais apresentadas por Nordlund <i>et al.</i> (1999) e Andersson (2007).....	73
Figura 8.1. Envoltórias de ruptura de H-B e de M-C equivalentes para os resultados de compressão confinada efetuados em amostras do Diorito Äspö.	75
Figura 8.2. Curvas tensão-deformação dos ensaios confinados para os modelos com a calibração inicial.	76
Figura 8.3. Curvas de deformações volumétricas dos ensaios confinados para os modelos com a calibração inicial.	76
Figura 8.4. Resultados dos modelos com a calibração inicial.....	77
Figura 8.5. Fraturamento dos modelos de compressão confinada com os parâmetros da calibração inicial.	78
Figura 8.6. Critério de ruptura de M-C para os blocos Voronoi e as juntas na a) calibração inicial e na b) calibração ajustada.	79
Figura 8.7. Curvas tensão-deformação dos ensaios confinados para os modelos com a calibração ajustada.	81
Figura 8.8. Curvas de deformações volumétricas dos ensaios confinados para os modelos com a calibração ajustada.	81
Figura 8.9. Resultados dos modelos com a calibração ajustada.....	82

Figura 8.10. Fraturamento dos modelos com os parâmetros da calibração ajustada.	82
Figura 8.11. Envoltórias de ruptura de H-B para os resultados de laboratório e dos modelos usando ambas as calibrações.....	84
Figura 9.1. Resposta do modelo ao carregamento cíclico de compressão para uma tensão vertical máxima aplicada de 150 MPa.....	87
Figura 9.2. Dano ocorrido no corpo de prova após cada ciclo de carregamento para uma tensão vertical máxima aplicada de 150 MPa.....	87
Figura 9.3. Resposta do modelo ao carregamento cíclico de compressão para uma tensão vertical máxima aplicada de 200 MPa.....	88
Figura 9.4. Dano ocorrido no corpo de prova após cada ciclo de carregamento para uma tensão vertical máxima aplicada de 200 MPa.....	88
Figura 9.5. Modos de fraturamento experimentados de acordo com tipo de carregamento aplicado. Adaptado de Sun & Jin (2012).....	89
Figura 9.6. Modelos dos ensaios a) 3PB e b) PTS usados na determinação da tenacidade de fratura nos Modos I e II, respectivamente. Dimensões apresentadas em milímetros.....	90
Figura 9.7. Processo de propagação de fraturas para o modelo do ensaio 3PB.....	91
Figura 9.8. a) Processo de fraturamento acontecido durante o ensaio PTS com e sem confinamento. Modificado de Backers & Stephansson (2015). b) Resultado do modelo sem confinamento empregando o CVBM heterogêneo.....	92
Figura 9.9. a) Processo de criação do modelo foliado e detalhe da estrutura dos blocos deformados comparados com a fotografia de uma rocha real apresentada por Passchier & Trouw (2005). b) Amostras geradas considerando diferentes valores de h/d comparadas com a configuração usada na Calibração 1.....	93
Figura 9.10. Diagramas de roseta para as direções das juntas registradas nos corpos de prova com diferentes inclinações β do plano de foliação respeito à linha horizontal ($h/d = 1,5$).	94
Figura 9.11. Tipo de ruptura acontecida nos corpos de prova para diferentes inclinações β do plano de foliação ($h/d = 1,5$).....	95
Figura 9.12. Influência da inclinação β do plano de foliação nas propriedades macroscópicas simuladas ($h/d = 1,5$).	96
Figura 9.13. a) Microscopia de lâmina delgada e b) tomografia computadorizada do basalto amigdalóide. c) e d) Resultado do ensaio de compressão simples efetuado sobre uma das amostras de rocha. e) Resultado do modelo FDEM. Adaptado de C. Zhang <i>et al.</i> , (2020).	96

Figura 9.14. a) Corpo de prova elaborado para representar o basalto amigdalóide, detalhando os dois tipos de materiais considerados. Resultados dos modelos de b) compressão simples e c) tração indireta empregando o CVBM heterogêneo.	97
Figura 9.15. Exemplo de amostra elaborada aplicando a abordagem probabilística na definição das propriedades dos blocos e juntas.	100
Figura B.1. Estrutura das juntas definida para todos os modelos com variabilidade espacial.	127

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURA E ABREVIACÕES

a	Comprimento do entalhe no ensaio de flexão de três pontos.
B	Espessura do corpo de prova do ensaio de flexão de três pontos.
c	Coesão macroscópica da rocha.
c_j	Coesão de pico dos elementos de junta.
c_v	Coesão de pico dos blocos Voronoi.
c_{rj}	Coesão residual dos elementos de junta.
c_{rv}	Coesão residual dos blocos Voronoi.
d	Largura média das partículas minerais.
D	Diâmetro de partícula do círculo equivalente com área igual à do polígono Voronoi.
D_{25}	Diâmetro de partícula para o qual o 25% dos minerais apresentam tamanhos menores.
D_{50}	Diâmetro de partícula para o qual o 50% dos minerais apresentam tamanhos menores.
D_{75}	Diâmetro de partícula para o qual o 75% dos minerais apresentam tamanhos menores.
D_{CP}	Diâmetro do corpo de prova.
E	Módulo de Young macroscópico da rocha.
E_0	Módulo de Young macroscópico inicial.
E_{50}	Módulo de Young macroscópico secante calculado ao 50% da resistência máxima.
E_v	Módulo de Young dos blocos Voronoi no CVBM.
E_v^i	Módulo de Young dos blocos Voronoi no CVBM heterogêneo para o tipo de mineral i .
F_v	Força vertical registrada durante os ensaios de tração indireta, flexão de três pontos ou cisalhamento perfurante.
h	Comprimento médio das partículas minerais.
K	Fator de intensidade de tensão.
K_C	Fator de intensidade de tensão crítico ou tenacidade de fratura.
K_{IC}	Tenacidade de fratura para o Modo I (abertura).
K_{IIC}	Tenacidade de fratura para o Modo II (cisalhamento no plano).
k_n	Rigidez normal do elemento de junta no CVBM.
k_s	Rigidez cisalhante do elemento de junta no CVBM.
k_n^i	Rigidez normal do elemento de junta de Homofase no CVBM heterogêneo para o mineral i .
k_n^{ij}	Rigidez normal do elemento de junta de Interfase no CVBM heterogêneo entre os minerais i e j .
l	Comprimento do elemento de junta.
l_e	Comprimento médio das partículas.

\bar{l}_j	Comprimento médio das juntas.
\bar{l}_j^{ref}	Comprimento médio das juntas de referência.
\bar{l}_m	Comprimento médio dos elementos internos que integram os blocos Voronoi.
L	Distância entre apoios para o ensaio de flexão de três pontos.
m	Número de juntas diferentes resultantes no CVBM heterogêneo.
m_i	Parâmetro da envoltória de ruptura de Hoek-Brown.
n	Número de minerais diferentes considerados no CVBM heterogêneo.
$P_{máx}$	Carga máxima registrada no ensaio de flexão de três pontos.
So	Coefficiente de graduação obtido da curva granulométrica.
t	Espessura do corpo de prova no ensaio de tração indireta.
T_j	Resistência a tração de pico dos elementos de junta.
T_v	Resistência a tração de pico dos blocos Voronoi.
T_{rj}	Resistência a tração residual dos elementos de junta.
T_{rv}	Resistência a tração residual dos blocos Voronoi.
W	Altura do corpo de prova do ensaio de flexão de três pontos.
α	Fator usado como parâmetro para a definição da rigidez normal das juntas.
β	Ângulo de inclinação do plano de foliação com relação à linha horizontal.
δ	Deslocamento medido no ensaio de tração indireta.
δ_v	Deslocamento vertical medido no ensaio de cisalhamento perfurante.
ΔF_n	Acréscimo de força normal à direção da junta.
ΔF_s	Acréscimo de força cisalhante na direção da junta.
Δu_n	Acréscimo de deslocamento normal à direção da junta.
Δu_s	Acréscimo de deslocamento cisalhante na direção da junta.
ε_a	Deformação axial.
ε_l	Deformação lateral.
ε_v	Deformação volumétrica total.
ε_v^c	Deformação volumétrica das fraturas.
ν	Coefficiente de Poisson macroscópico da rocha.
ν_0	Coefficiente de Poisson macroscópico inicial.
ν_{50}	Coefficiente de Poisson macroscópico secante calculado ao 50% da resistência máxima.
ν_v	Coefficiente de Poisson dos blocos Voronoi no CVBM.
ν_v^i	Coefficiente de Poisson dos blocos Voronoi no CVBM heterogêneo para o tipo de mineral i .
σ_1, σ_a	Tensão axial aplicada durante o ensaio.
σ_3	Tensão de confinamento aplicada durante o ensaio.
σ_{ci}	Parâmetro da envoltória de ruptura de Hoek-Brown.
$\sigma_{máx}$	Tensão máxima atingida nos ensaios de compressão confinada.
σ_t	Tensão de tração calculada no ensaio de tração indireta.

σ_v	Tensão vertical medida ao interior do corpo de prova.
$\bar{\sigma}_v$	Tensão vertical média medida ao interior do corpo de prova.
ϕ	Ângulo de atrito macroscópico da rocha.
ϕ_j	Ângulo de atrito de pico dos elementos de junta.
ϕ_v	Ângulo de atrito de pico dos blocos Voronoi.
ϕ_{rj}	Ângulo de atrito residual dos elementos de junta.
ϕ_{rv}	Ângulo de atrito residual dos blocos Voronoi.
ψ_v	Ângulo de dilatação dos blocos Voronoi.
A	Nomenclatura para definir o tipo de material Amígdala.
3PB	Ensaio de flexão de três pontos, sigla em inglês (<i>Three-Point Bending test</i>).
BBM	Modelo de blocos colados, sigla em inglês (<i>Bounded Block Model</i>).
BC	Nomenclatura para definir o tipo de mineral Biotita/Clorita.
BPM	Modelo de partículas coladas, sigla em inglês (<i>Bounded Particle Model</i>).
BTS	Resistência à tração indireta da rocha, siglas em inglês (<i>Brazilian Tensile Strength</i>).
CB	Ensaio de flexão em amostra tipo Chevron, sigla em inglês (<i>Chevron-Bend test</i>).
CC	Tensão de fechamento de fratura pré-existent, sigla em inglês (<i>Crack Closure stress</i>).
CD	Tensão de dano por fraturas, sigla em inglês (<i>Crack Damage stress</i>).
CI	Tensão de início das fraturas, sigla em inglês (<i>Crack Initiation stress</i>).
CV	Coefficiente de variação.
CVBM	Modelo Contínuo de Blocos Voronoi, sigla em inglês (<i>Continuum Voronoi Block Model</i>).
DEM	Método de elementos discretos, siglas em inglês (<i>Discrete Element Method</i> ou <i>Distinct Element Method</i>).
F	Nomenclatura para definir o tipo de mineral K-Feldspato.
FEM	Método de elementos finitos, siglas em inglês (<i>Finite Element Method</i>).
FDEM ou FEM-DEM	Método híbrido de elementos finitos-discretos, siglas em inglês (<i>Finite-Discrete Element Method</i>).
GBM	Modelo baseado em partículas, sigla em inglês (<i>Grain Based Model</i>).
H-B	Critério de ruptura de Hoek-Brown.
M	Nomenclatura para definir o tipo de material Matriz.
M-C	Critério de ruptura de Mohr-Coulomb.
P	Nomenclatura para definir o tipo de mineral Plagioclásio.
PTS	Ensaio de cisalhamento perfurante, sigla em inglês (<i>Punch Through Shear test</i>).
Q	Nomenclatura para definir o tipo de mineral Quartzo.
RS2	Software desenvolvido pela empresa Rocscience, (<i>Rock and Soil 2-dimensional analysis program</i>).
UCS	Resistência à compressão não confinada da rocha, sigla em inglês (<i>Unconfined Compressive Strength</i>).

1. INTRODUÇÃO

1.1. APRESENTAÇÃO

Nas últimas décadas, o estudo do comportamento das rochas vem sendo incrementado por conta do aumento na quantidade de obras desenvolvidas no espaço subterrâneo. Projetos de túneis, mineração, cavernas ou depósitos de resíduos radiativos são exemplos de obras que precisam do entendimento da mecânica destes materiais, a fim de prever a sua resposta ante os diferentes tipos de carregamentos experimentados. Com este objetivo em mente, continuamente estão sendo desenvolvidas técnicas experimentais e numéricas que visam representar vários dos fenômenos que envolvem as rochas e os maciços rochosos, porém alguns deles ainda hoje não são compreendidos completamente.

Em relação à modelagem numérica, em várias oportunidades, as rochas têm sido consideradas como materiais homogêneos e isotrópicos que apresentam umas características macroscópicas particulares, geralmente obtidas de ensaios de laboratório. Contudo, estes materiais são inerentemente heterogêneos, seja na escala dos minerais ou quando considerados nos maciços rochosos, onde a intervenção de estruturas particulares pode induzir comportamentos dificilmente representados por modelos homogêneos (Figura 1.1).

Mais especificamente, na escala dos minerais, o comportamento das rochas está fortemente influenciado pela heterogeneidade devida à diferença no tipo, tamanho e forma dos minerais, o comprimento, orientação e propriedades mecânicas das interfaces e a presença de defeitos, vazios e microfraturas, provocando a concentração de tensões e o desenvolvimento de tensões de tração que levam ao surgimento e propagação das fraturas, com a subsequente perda de resistência (Lan *et al.*, 2010; Mahabadi *et al.*, 2012; Ghazvinian *et al.*, 2014).

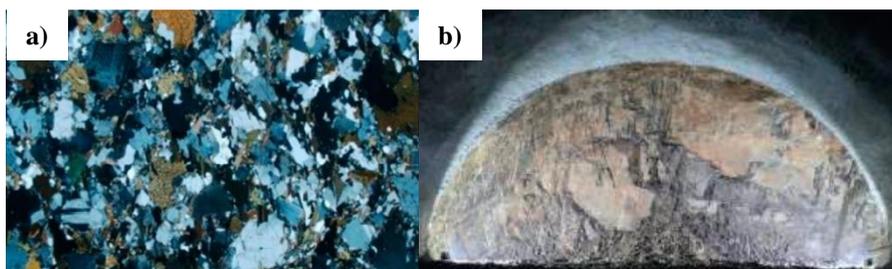


Figura 1.1. a) Imagem de lâmina delgada de um Gnaisse. Modificado de D. Li *et al.* (2022) b) Frente da escavação do túnel Xiaosanxia na China. Modificado de Qiu *et al.* (2021).

Na atualidade e graças ao desenvolvimento de métodos numéricos de abordagem discreta, as pesquisas tem-se direcionado na simulação explícita destas estruturas, procurando melhorar na representação dos diferentes tipos de rochas nas escalas de laboratório e de campo. Entre os métodos mais utilizados tem-se, por exemplo, o Método dos Elementos Discretos (DEM) (Gao *et al.*, 2016; Park *et al.*, 2017; Wang & Cai, 2019; Sinha & Walton, 2020a), o Método híbrido de Elementos Finitos-Discretos (FDEM o FEM-DEM) (Munjiza *et al.*, 1995; Mahabadi *et al.*, 2012; Feng *et al.*, 2019; C. Zhang *et al.*, 2020; X. F. Li *et al.*, 2020) e os Métodos Lattice ou de Molas e corpos rígidos (Asahina *et al.*, 2017; Rasmussen & de Assis, 2018). Todavia, estes métodos apresentam um elevado tempo de processamento, devido principalmente à necessidade de detecção dos contatos entre elementos, o que dificulta as etapas de calibração e as análises de sensibilidade dos parâmetros que descrevem o tipo de material representado.

Por outro lado, a modelagem empregando o Método de Elemento Finitos (FEM) vem sendo enriquecida recentemente pela implementação da técnica pseudo-descontínua bidimensional denominada Modelo Continuo de Blocos Voronoi (*Continuum Voronoi Block Model - CVBM*) (Rógenes, 2021), na qual o material é simulado como um conjunto de blocos poligonais de tipo Voronoi unidos por elementos de junta de Goodman, similar aos Modelos Baseados em Partículas (*Grain Based Model - GBM*) usados na atualidade para representar o comportamento das rochas.

Nos GBMs, geralmente são empregadas técnicas de processamento de imagens para definir as características da estrutura interna destes materiais, gerando o corpo de prova sintético como uma agrupação de regiões que interagem nas suas fronteiras, atribuindo um tipo de mineral a cada região particular. Estas regiões podem ser, por exemplo, polígonos, circunferências ou clusters de circunferências na condição bidimensional (Yahui Zhang & Wong, 2018), e esferas ou poliedros nas versões tridimensionais (Ghazvinian *et al.*, 2014; H. Li *et al.*, 2020).

A maioria dos trabalhos que integram o conceito do GBM procuram retratar a distribuição de tamanho, geometria e variedade dos minerais (Lan *et al.*, 2010; Gao *et al.*, 2016; Abdelaziz *et al.*, 2018; Wang & Cai, 2019) e, em alguns casos, outras características como a presença de microfaturas (Rasmussen *et al.*, 2018; Saksala, 2022), inclusões (C. Zhang *et al.*, 2020) ou a direção preferencial dos minerais (Ghazvinian *et al.*, 2014).

1.2. MOTIVAÇÃO

O Modelo Contínuo de Blocos Voronoi tem-se mostrado como uma ferramenta robusta na representação do comportamento e fraturamento das rochas, com tempos reduzidos de processamento quando comparado com as abordagens discretas. Entre as análises que têm empregado o CVBM, destaca-se, por exemplo, a modelagem de rochas intactas e degradadas submetidas a ensaios de laboratório (Y. Li & Bahrani, 2021a; Rógenes *et al.*, 2022), o estudo de pilares sob condições de compressão e cisalhamento (Y. Li & Bahrani, 2020, 2021b; Hamediazad & Bahrani, 2021, 2022), a modelagem de taludes rochosos (Spreafico *et al.*, 2017) e a simulação da ruptura frágil acontecida em túneis (Rógenes, 2021; Sanipour *et al.*, 2022) (Figura 1.2).

Estes mesmos autores descrevem as principais vantagens do CVBM como sendo a sua acessibilidade e facilidade de implementação, a eficiência do processo de calibração, o seu baixo custo computacional, a facilidade de extrapolação para a escala de campo e a capacidade de representar comportamentos macroscópicos das rochas, como, por exemplo, as envoltórias de ruptura não lineares.

No entanto, o CVBM conta com algumas limitações relevantes como a incapacidade da separação entre as partículas, a impossibilidade de geração de novos contatos internos e a consideração da heterogeneidade causada apenas pela estrutura dos blocos Voronoi. Segundo Peng *et al.* (2017), Abdelaziz *et al.* (2018), Sinha & Walton (2020a) e Xiao *et al.* (2021), a integração de outras fontes de heterogeneidade permite conseguir uma representação mais realista da ruptura da rocha e uma melhor aproximação do comportamento na condição confinada. Igualmente poderia contribuir na reprodução da variabilidade natural da resposta destes materiais e no entendimento do desenvolvimento das tensões internas ao longo do processo de carregamento.

Não obstante, a conhecimento do autor, atualmente o software mais empregado que tem incorporado o CVBM (RS2 - *Rock and Soils 2-dimensional analysis program*) (Rocscience Inc, 2022) não permite atribuir diferentes tipos de materiais a cada região específica do corpo de prova, de forma simples e aleatória, o que dá origem aos objetivos propostos para este trabalho, tal e como se apresenta na seção seguinte.

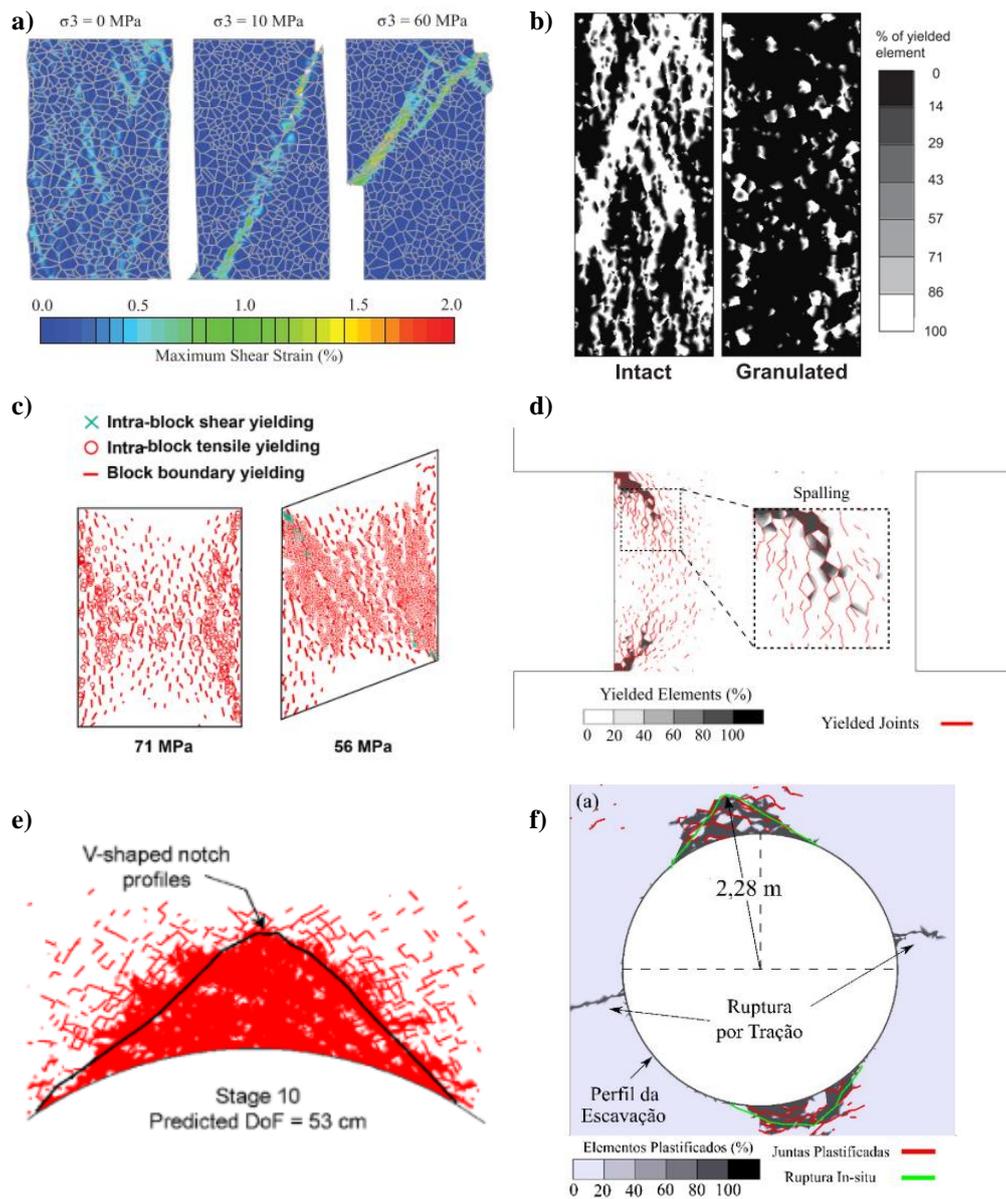


Figura 1.2. Exemplos de aplicação do CVBM na área da mecânica das rochas: ensaios de compressão em amostras de rocha intacta e degradada a) (Rógenes *et al.*, 2022) e b) (Y. Li & Bahrani, 2021a), análise da ruptura de pilares sob compressão e cisalhamento c) (Hamediazad & Bahrani, 2022) e d) (Rógenes *et al.*, 2023), modelagem de ruptura de túneis e) (Sanipour *et al.*, 2022) e f) (Rógenes, 2021).

1.3. OBJETIVOS

Esta pesquisa tem como objetivo geral representar o comportamento das rochas considerando a heterogeneidade estrutural, material e de contatos por meio do CVBM.

Especificamente, pretende-se:

- Integrar a heterogeneidade material e de contatos no Modelo Contínuo de Blocos Voronoi adotando as abordagens percentual e probabilística,
- Representar o comportamento das rochas na escala de laboratório considerando a heterogeneidade interna do material a partir de simulações numéricas,
- Analisar o efeito da estrutura interna e do tamanho dos diferentes elementos do modelo sobre a resposta macroscópica simulada,
- Apresentar um procedimento de calibração para o CVBM heterogêneo,
- Representar numericamente o comportamento das rochas submetidas a estados de carregamento especiais usados na determinação da tenacidade de fratura,
- Modelar o comportamento de rochas que apresentam foliação ou inclusões na sua estrutura interna.

1.4. ORGANIZAÇÃO DA TESE

Esta tese está estruturada em dez capítulos. O Capítulo 1 faz a introdução ao trabalho, dando uma breve apresentação do tema abordado, descrevendo o problema, a justificativa e os objetivos tanto geral quanto específicos. Além disso, é apresentado o resumo da estrutura e do conteúdo de cada capítulo.

No Capítulo 2 é feita a revisão da bibliografia relacionada com o comportamento das rochas na escala de laboratório, explicando alguns conceitos relevantes sobre o processo de fraturamento e as características da curva tensão-deformação. De igual forma, são apresentadas as diversas fontes de heterogeneidade interna das rochas e as abordagens empregadas comumente para sua aproximação numérica.

O Capítulo 3 descreve o funcionamento do Modelo Contínuo de Blocos Voronoi convencional (CVBM), as propriedades a serem definidas e a implementação da heterogeneidade material e

de contatos levada a cabo nesta pesquisa, explicado as hipóteses e simplificações adotadas na determinação dos valores de vários dos parâmetros do modelo.

No Capítulo 4 é empregado o CVBM heterogêneo para simular a resposta das rochas nas condições de compressão simples e tração indireta, tomando como exemplo a representação do Diorito Äspö, apresentando o procedimento de calibração utilizado, a análise dos parâmetros mais relevantes e o processo de fraturamento conseguido para ambos os casos.

O Capítulo 5 mostra a análise de sensibilidade dos resultados com relação ao tamanho dos diferentes elementos que compõem o corpo de prova numérico e no Capítulo 6 é feita a comparação entre os modelos calibrados empregando as versões convencional e heterogênea, avaliando o desenvolvimento das tensões internas e dos diferentes tipos de fraturas com o decorrer do carregamento.

No Capítulo 7 são estudados os efeitos da variabilidade na definição da estrutura interna da amostra, avaliando a influência da mudança do tipo de material atribuído a cada região e da disposição dos blocos Voronoi sobre o comportamento macroscópico do modelo.

No Capítulo 8 são exibidos os resultados das modelagens para os casos de compressão biaxial, realizando as análises correspondentes sobre a representação da envoltória de ruptura não linear e sobre o efeito da variabilidade estrutural na simulação das tensões máximas atingidas pelo modelo.

No Capítulo 9 é feita uma compilação de várias das análises preliminares relacionadas com a utilização do CVBM heterogêneo na representação de rochas que apresentam foliação ou inclusões na sua estrutura interna, ou aquelas submetidas a carregamentos cíclicos e ensaios de tenacidade de fratura. Neste capítulo também é apresentada a implementação da abordagem probabilística

Por último, no Capítulo 10 são expostas as conclusões gerais do trabalho e as propostas para futuras pesquisas científicas.

2. COMPORTAMENTO DAS ROCHA EM LABORATÓRIO E HETEROGENEIDADE NA ESCALA DOS MINERAIS

A maioria das rochas podem ser definidas como aqueles corpos sólidos de origem natural conformados por partículas minerais que se têm aglomerado em decorrência de um processo geológico determinado. A estrutura interna e textura resultantes estão influenciadas principalmente pelas condições de temperatura e pressão atuantes no momento da formação e pela história evolutiva da rocha, definindo os tipos de minerais presentes, a sua granulometria e a sua disposição espacial, originando a heterogeneidade interna do material (Barros de Oliveira & Pretz, 1998; Gozález de Vallejo *et al.*, 2002). Estas características particulares são alguns dos fatores principais que determinam o comportamento mecânico macroscópico da rocha e a presença de anisotropia, planos de fraqueza e outros fenômenos na escala mineralógica que impactam na resposta do material quando submetido a diferentes tipos de carregamentos.

Nos últimos anos, tem aumentado o número de pesquisas focadas na análise do comportamento das rochas analisando o efeito da sua heterogeneidade interna (Figura 2.1), seja desde o ponto de vista numérico com a integração explícita de diferentes fontes de heterogeneidade nos modelos (p. ex. Inga *et al.* (2023) e Quan *et al.* (2023)), e/ou por meio de técnicas experimentais, baseadas principalmente na microscopia e na microtomografia computadorizada (p. ex. C. Zhang *et al.* (2020), Wan & Li (2022) e Liu *et al.* (2023)).

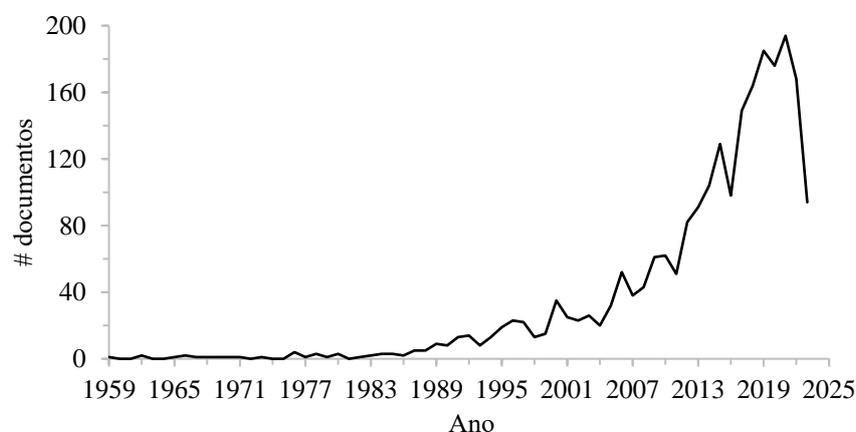


Figura 2.1. Número de pesquisas por ano indexadas no site Scopus (Elsevier, 2023) que possuem no título, resumo ou palavras chaves os termos “rock”, “heterogeneity” ou “heterogeneous”, e “laboratory”.

Neste capítulo são resumidos os conceitos mais relevantes que serão empregados ao longo deste trabalho, começando com uma descrição do comportamento geral das rochas em laboratório e do processo de fraturamento experimentado para diferentes condições de carregamento. Logo, é apresentada uma classificação das fontes de heterogeneidade interna baseada nas diversas características físicas dos minerais e, por fim, são mencionadas algumas das técnicas numéricas empregadas atualmente que tentam levar em consideração a textura do material simulado.

2.1. DESCRIÇÃO DO COMPORTAMENTO E FRATURAMENTO DE ROCHAS EM LABORATÓRIO

De forma geral, o comportamento das rochas na escala de laboratório pode ser caracterizado por meio dos ensaios de resistência à compressão não confinada e confinada, também chamados de compressão simples (ensaio UCS – *Unconfined Compressive Strength test*) e triaxial, e de resistência a tração direta e indireta, este último conhecido também como ensaio Brasileiro (ensaio BTS – *Brazilian Tensile Strength test*). Nesses ensaios, o corpo de prova é submetido a um tipo de carregamento em particular até atingir a ruptura, sendo registradas algumas variáveis no processo que ajudam na determinação da sequência de fraturamento e da resistência máxima da rocha.

A resposta das rochas nas condições de compressão simples e triaxial geralmente é representada por meio da curva tensão-deformação (Figura 2.2), podendo ser dividida em cinco zonas que representam diferentes estágios do processo de fraturamento (Bieniawski, 1967a, 1967b; Wawersik & Fairhurst, 1970; Martin & Chandler, 1994; Hoek & Martin, 2014). Estas zonas são:

- Zona I: caracterizada por uma concavidade positiva causada pelo fechamento das fraturas pré-existentes na rocha (trecho $0-a$). O fenômeno é pouco notório nos ensaios triaxiais por conta do fechamento das fraturas ocorrido durante a etapa de confinamento. Nesta zona a deformação é considerada como não linear elástica, embora existam indícios de deterioração localizada e esmagamento do material. O ponto de transição para a seguinte zona recebe o nome de tensão de fechamento de fraturas (*Crack Closure stress - CC*).
- Zona II: definida como a etapa de deformação elástica linear (trecho $a-b$). O comprimento desta zona depende do tipo de rocha analisada, da tensão de confinamento e da sensibilidade na obtenção dos resultados. Geralmente, os parâmetros de elasticidade são obtidos neste trecho para o ensaio de compressão simples.

- Zona III: ou zona de crescimento estável das fraturas (trecho *b-c*); começa o afastamento progressivo do comportamento linear e a geração de emissões acústicas causadas pela liberação de energia em forma de ondas elásticas produto da nucleação e propagação das fraturas. O material começa a dilatar, aumentando o coeficiente de Poisson aparente. O ponto de início desta etapa (ponto *b*), chamado de tensão de início das fraturas (*Crack Initiation stress* - CI), acontece geralmente entre 30 e 70% da tensão máxima. Para o caso sem confinamento ocorre a propagação das fraturas pré-existente e a geração de novas fraturas predominantemente na direção da tensão principal maior.

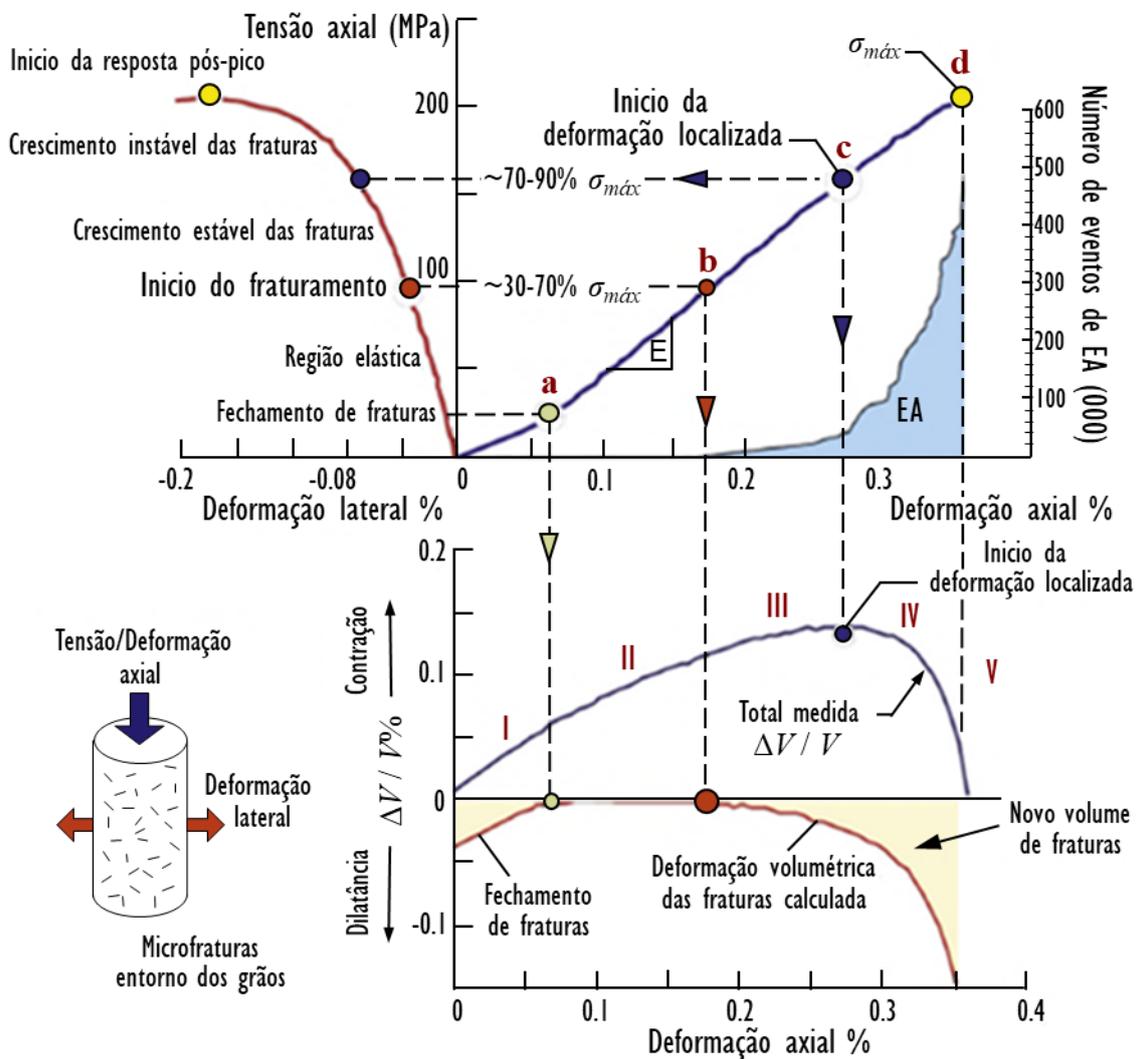


Figura 2.2. Esquema da curva tensão-deformação em condição de compressão com as regiões ou zonas com comportamento diferenciado. Modificado de Hoek & Martin (2014).

- Zona IV: recebe o nome de zona de crescimento instável das fraturas (trecho *c-d*); as microfraturas começam a se localizar em uma região concreta ou banda, qualquer incremento de tensão levará a uma degradação permanente do material e, posteriormente, à geração de fraturas macroscópicas. O ponto *c* é conhecido como tensão de dano por fraturas (*Crack Damage stress - CD*) cujo valor está entre 70 e 90% da tensão de pico. No ensaio de compressão simples, as fraturas predominantes na direção axial começam a se comunicar por fraturas do tipo cisalhante, até que o material experimenta a tensão máxima ou tensão de pico (ponto *d*) e finalmente acontece a ruptura da rocha.
- Zona V: chamada também de zona pós-pico; dependendo do comportamento nesta região a rocha pode ser classificada em tipo I ou II. As rochas tipo I apresentam deformações axiais monotônicas depois de atingida a tensão máxima de forma que, para que as fraturas sigam se propagando, é necessário acrescentar carga sobre o corpo de prova. Ao contrário, as rochas tipo II conseguem armazenar uma maior quantidade de energia que a necessária para gerar e propagar as fraturas nesta região, acontecendo uma ruptura rápida que provoca a queda abrupta e significativa da tensão aplicada. Segundo He *et al.* (1990), nas rochas tipo I, a taxa de acréscimo das deformações plásticas é maior que a taxa de perda das deformações elásticas, acontecendo o contrário para as rochas tipo II, sendo necessário neste último caso, diminuir a energia armazenada ao permitir certo grau de recuperação elástica, de forma que o comportamento pós-pico possa ser registrado (Figura 2.3).

As fraturas geradas durante o processo de carregamento podem ser catalogadas de acordo com a região onde se desenvolvem: as fraturas intergranulares acontecem nas interfaces entre minerais, as fraturas intragranulares são geradas ao interior dos minerais, e as fraturas transgranulares são aquelas que atravessam diferentes tipos de minerais (Nicksiar, 2013; Gulizzi *et al.*, 2018).

De forma geral, para rochas frágeis submetidas ao estado de compressão, o fraturamento inicia nas interfaces entre minerais como resultado de tensões de tração desenvolvidas a causa da heterogeneidade interna da rocha, principalmente naquelas interfaces com direção próxima da direção de tensão máxima aplicada. Logo, a coalescência das fraturas acontece pela ruptura por cisalhamento dos minerais (fraturas intragranulares e transgranulares), resultando no desenvolvimento do tipo de falha denominado *axial splitting*.

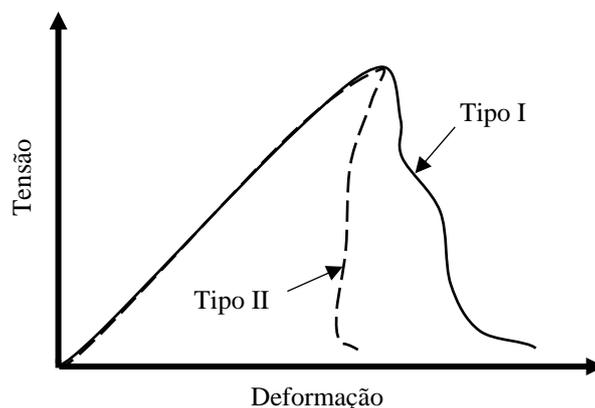


Figura 2.3. Representação das rochas tipo I e II respeito ao comportamento pós-pico.

Adaptado de Wawersik & Fairhurst (1970).

Com a aplicação de confinamento, a geração de faturas por tração fica mais restrito, especialmente as intergranulares, acontecendo principalmente fraturas intragranulares de tipo cisalhante, mudando o tipo de fraturamento conforme a tensão de confinamento aumenta (Park *et al.*, 2017; Sinha & Walton, 2020a; Yanbo Zhang *et al.*, 2020).

As tensões CC, CI, CD e máxima são chamadas de tensões características e representam pontos de mudança do comportamento influenciado pela presença de fraturas. As tensões CI e CD são de grande interesse para a mecânica das rochas pela aparente relação com a resistência dos maciços rochosos para baixas tensões de confinamento e no longo prazo, respectivamente (Bieniawski, 1967c; Bewick *et al.*, 2019). Existem vários métodos para determinar estas tensões características, por exemplo, o valor de CD pode ser definido, segundo Martin & Chandler (1994) e Peng *et al.*, (2018), a partir do ponto de reversão das deformações volumétricas totais ε_v aproximadas pela Equação 2.1:

$$\varepsilon_v = \varepsilon_a + 2\varepsilon_l \quad (2.1)$$

sendo ε_a a deformação axial e ε_l a deformação lateral medidas no corpo de prova ao longo do ensaio. Já a tensão CI pode ser estipulada como o ponto de reversão das deformações volumétricas das fraturas ε_v^c que, segundo os mesmos autores, são calculadas pela Equação 2.2:

$$\varepsilon_v^c = \varepsilon_v - \frac{1-2\nu}{E}(\sigma_1 - \sigma_3) \quad (2.2)$$

sendo E e ν o módulo de Young e o coeficiente de Poisson macroscópicos da rocha, σ_1 e σ_3 as tensões axial e de confinamento aplicadas em cada momento do ensaio, respectivamente.

Outros procedimentos existentes para o cálculo de CI são: o ponto de início da não linearidade na curva tensão-deformação lateral, o ponto de desvio da linearidade inicial da curva tensão-módulo de rigidez lateral tangente inverso (*Inverse Tangent Lateral Stiffness* - ITLS) ou o ponto de aceleração do número de fraturas por tração normalizado; e para a tensão CD: o ponto de aceleração do número de fraturas por cisalhamento normalizado, o ponto de início da não linearidade na curva tensão-deformação axial ou de início do decaimento do módulo de Young tangente ou por meio dos resultados de emissões acústicas (Eberhardt *et al.*, 1998; Ghazvinian, 2010; Nicksiar & Martin, 2012; Wen *et al.*, 2018; X. F. Li *et al.*, 2020).

Por outro lado, no ensaio de tração direta, o comportamento da rocha é mais simples por conta da abertura das fraturas pré-existentes que evita o atrito entre as suas faces. Usualmente, é considerado que o início e a propagação de algumas fraturas levam rapidamente à falha, sendo a tensão do início das fraturas, aproximadamente igual à tensão de ruptura ou tensão máxima de tração (Bieniawski, 1967c; Aubertin & Simon, 1997).

No caso do ensaio de tração indireta, geralmente são obtidos valores de resistência à tração maiores que no ensaio de tração direta por conta da geração de tensões mais complexas nas regiões de contato com as placas de carregamento em na região central do corpo de prova. Teoricamente o fraturamento acontece por indução de tensões de tração no centro do corpo de prova como resultado do carregamento diametral por compressão, não obstante, existe evidência experimental de que as que as fraturas podem acontecer mais perto das placas de carregamento (D. Li & Wong, 2013; Chen & Konietzky, 2014).

2.2. FONTES DA HETEROGENEIDADE INTERNA NAS ROCHAS

Lan *et al.* (2010) identificam três fontes principais da heterogeneidade interna das rochas na escala dos minerais: a heterogeneidade geométrica, causada por a diferença no tamanho e forma dos minerais, a heterogeneidade elástica ou material, gerada por o contraste de rigidezes entre diferentes tipos de minerais, e a heterogeneidade de contato, devida à variabilidade no comprimento, orientação e propriedades mecânicas dos contatos entre partículas.

A presença de microfraturas, orientações mineralógicas geradas por processos de metamorfismo ou a presença de inclusões e outros defeitos também podem afetar o comportamento macroscópico do material (Ghazvinian *et al.*, 2014; C. Zhang *et al.*, 2020) (Figura 2.4). Todos estes fatores fazem com que o comportamento das rochas seja dificilmente representado por modelos homogêneos e contínuos.

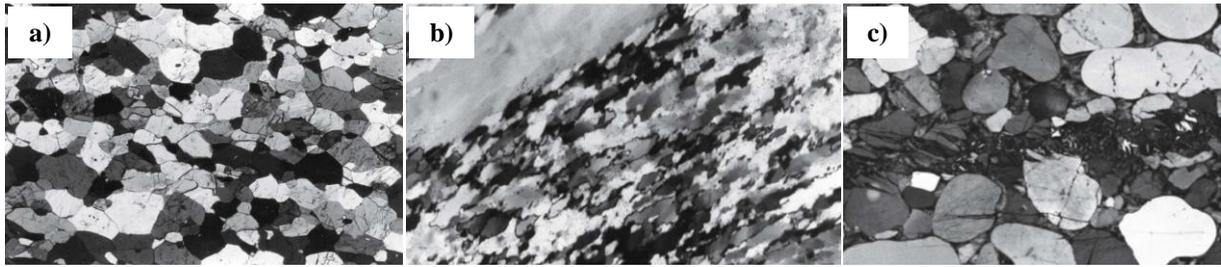


Figura 2.4. Microfotografias em luz polarizada da estrutura mineralógica das rochas exemplificando a) a variabilidade na forma, tipo y tamanho dos minerais, b) a orientação preferencial dos minerais e c) a presença de microfraturas. Adaptado de Passchier & Trouw (2005).

2.3. REPRESENTAÇÃO NUMÉRICA DAS ROCHAS CONSIDERANDO A HETEROGENEIDADE INTERNA

Durante vários anos o comportamento das rochas foi estudado desde o ponto de vista macroscópico como um único material que pode ser analisado e caracterizado a partir, especialmente, de ensaios de laboratório. Várias tentativas de reproduzir este comportamento usando modelos numéricos têm sido desenvolvidas ao longo dos anos, porém aqueles modelos que consideram a heterogeneidade interna vem apresentando uma melhor aproximação com relação aos resultados experimentais, de modo que uma descrição correta destas características é de grande importância para o estudo do comportamento mecânico e do processo de fraturamento das rochas (Xiao *et al.*, 2021).

A heterogeneidade tem um papel essencial no comportamento das rochas, já que proporciona a concentração de tensões e a geração de tensões de tração em locais particulares, promovendo o surgimento e propagação de fraturas (Mahabadi *et al.*, 2012). Como foi visto, o comportamento das rochas nos ensaios de laboratório pode ser dividido em zonas de acordo com os diferentes estágios do processo de fraturamento, assim uma correta representação da heterogeneidade possibilita uma melhor aproximação dos modelos numéricos.

Nesta linha, Valley *et al.* (2010) destacam a importância da representação explícita dos diferentes tipos de heterogeneidade, além da presença de microfraturas, na modelagem do comportamento das rochas. Yanbo Zhang *et al.* (2020) concluem que a variação da estrutura mineralógica não tem muita influência na etapa elástica, mas pode levar a um desenvolvimento completamente diferente das fraturas, causando variabilidade das propriedades macroscópicas, modos de ruptura, comportamento elasto-plástico e pós-pico. Sinha & Walton (2020a, 2020b)

constatam que a heterogeneidade é de grande importância na geração de tensões locais que proporcionam uma melhor representação tanto do comportamento pré-pico, quanto do pós-pico, para os diferentes níveis de confinamento.

Múltiplos avanços aconteceram a respeito da representação numérica do fraturamento e da estrutura interna das rochas. Desde o desenvolvimento do método de elementos discretos por Cundall & Strack (1979) e o aumento da capacidade de cálculo computacional um grande número de modelos tem sido propostos para representar a rocha como um conjunto de partículas que interagem entre elas. Dentre esses modelos se destacam o modelo de partículas coladas (*Bounded Particle Model* - BPM) usado por Potyondy & Cundall (2004), o modelo de blocos colados (*Bounded Block Model* - BBM) empregado por Lan *et al.* (2010), o modelo Lattice adaptado por Rasmussen *et al.* (2018) ou incluso no método híbrido de elementos finitos-discretos (*Finite-Discrete Elemento Method* - FDEM ou FEM-DEM) apresentado por Munjiza *et al.* (1995). Yahui Zhang & Wong (2018) contribuíram com uma descrição mais detalhada destes e outros tipos de modelos usados na representação das rochas considerando a estrutura mineralógica.

Em relação à representação da heterogeneidade, dois tipos de abordagens são empregados comumente: a primeira é a disposição aleatória das propriedades, adotando alguma distribuição de probabilidade (Mahabadi *et al.*, 2014; Manouchehrian & Cai, 2016; Feng *et al.*, 2019; Pakzad *et al.*, 2020), e a segunda é a geração do modelo numérico por meio de processamento de imagens (Yue *et al.*, 2003; Mahabadi *et al.*, 2012; Yanbo Zhang *et al.*, 2020) (Figura 2.5).

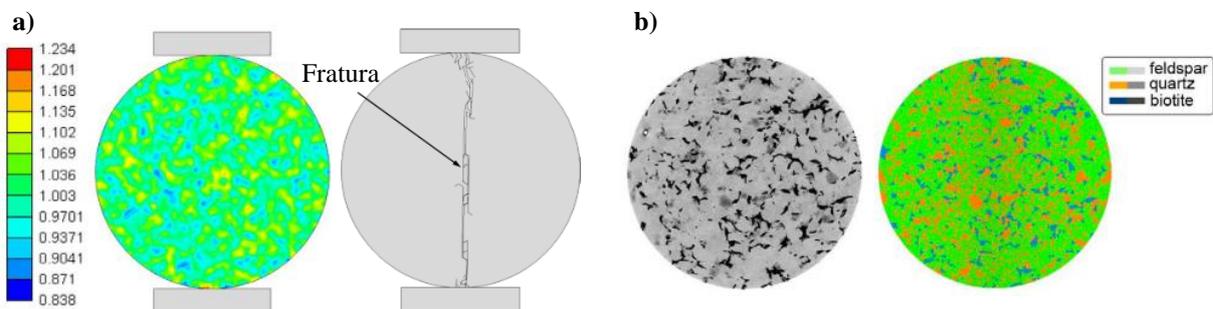


Figura 2.5. Modelos FDEM de ensaio BTS empregando a) distribuição de probabilidade (Modificado de Feng *et al.* (2019)) e b) processamento de imagem (Adaptado de Mahabadi *et al.* (2014)).

A principal vantagem de usar distribuições de probabilidade é a quantidade arbitrária de modelos que podem ser gerados, permitindo a análise do efeito da variação na disposição espacial das propriedades sobre resultados dos modelos. Em contrapartida, existem questionamentos a respeito da representação da estrutura mineralógica real da rocha, a forte dependência do tipo de distribuição escolhida e a falta de sentido físico dos parâmetros empregados na sua definição (Mahabadi *et al.*, 2014).

Com o método de processamento de imagens é possível reproduzir a distribuição espacial dos minerais da seção transversal analisada, porém o número de modelos gerados está restrito à quantidade de amostras reais diferentes que podem ser obtidas, impossibilitando uma análise aprofundada da variabilidade dos resultados (Xiao *et al.*, 2021). Outra desvantagem desse método é a dificuldade na aplicação a modelos de escala de campo, estando limitada principalmente a simulações de ensaios de laboratório com uma quantidade de elementos que permita tempos de processamento aceitáveis.

Uma abordagem que vem sendo empregada amplamente nos GBMs (Chen & Konietzky, 2014; Park *et al.*, 2017; Sinha & Walton, 2020b) e que pode ser inserida dentro do método de processamento de imagens surge da obtenção do conteúdo mineralógico e da distribuição de tamanho dos minerais por meio de análises de lâminas delgadas, transferindo esses dados ao modelo numérico e dando as propriedades correspondentes a cada tipo de mineral em particular (Figura 2.6-a).

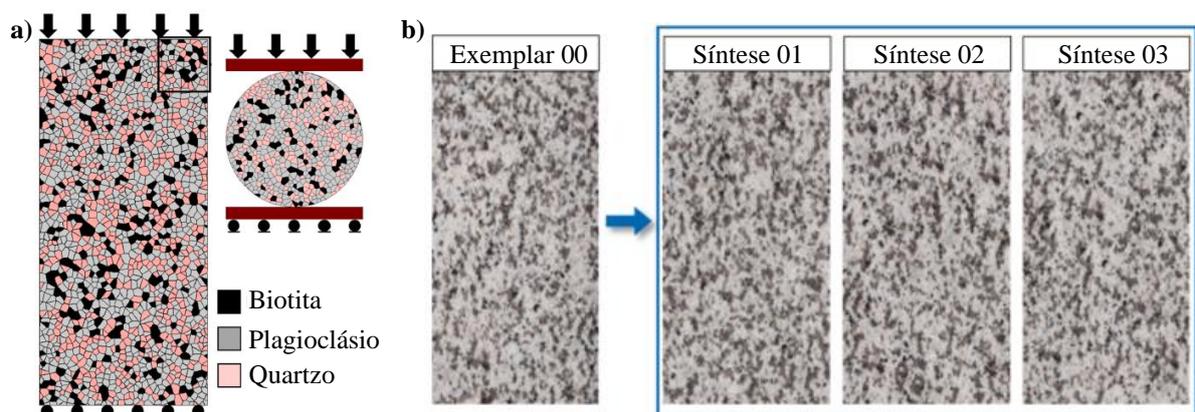


Figura 2.6. Geração do modelo numérico a) considerando o conteúdo mineralógico (Modificado de Sinha & Walton (2020a)) e b) por meio do método de síntetização da textura (Modificado de Xiao *et al.* (2021)).

Por outro lado, Xiao *et al.* (2021) têm desenvolvido uma nova técnica que aproveita o processamento de imagens e a criação de modelos numéricos com características similares na escala dos minerais mediante a técnica de sintetização de textura, conseguindo avançar na técnica de processamento de imagens (Figura 2.6-b).

3. MODELO CONTÍNUO DE BLOCOS VORONOI HETEROGÊNEO

Neste capítulo é feita a descrição geral do Modelo Contínuo de Blocos Voronoi convencional (*Continuum Voronoi Block Model - CVBM*), apresentando a sua formulação numérica, os elementos constituintes e as propriedades necessárias para a definição do comportamento do material.

Da mesma forma, é detalhado o procedimento seguido nesta pesquisa para incorporar outras fontes de heterogeneidade não consideradas na formulação original, além das simplificações adotadas para lograr uma maior praticidade durante o procedimento de calibração, definindo as características do “CVBM heterogêneo” que será empregado nas análises subsequentes.

3.1. CVBM (*CONTINUUM VORONOI BLOCK MODEL*)

O CVBM é o nome dado por Rógenes (2021) ao modelo bidimensional baseado na formulação FEM de integração implícita que aproveita as capacidades do *software* RS2 para gerar redes de juntas no formato Voronoi. Esta rede permite dividir o espaço 2D em um conjunto de blocos poligonais (blocos Voronoi) que se relacionam só com os seus blocos vizinhos por meio das juntas, permitindo representar o comportamento das rochas na condição de deformação plana. Durante a etapa de modelagem, não é possível identificar ou criar novas interações entre os blocos, pelo que o modelo é considerado como uma técnica pseudo-descontínua.

O CVBM apresenta características próprias dos GBMs, por conta da divisão em blocos Voronoi que simula a estrutura mineralógica das rochas (Figura 3.1-a,b), permitindo considerar a heterogeneidade geométrica do material (Y. Li & Bahrani, 2021a). O modelo também é conhecido por outros autores como Modelo contínuo Baseado em Partículas RS2-GBM ou Modelo de Tesselado Voronoi baseado no contínuo RS2-VTM (Y. Li & Bahrani, 2021a; Hamediazad & Bahrani, 2022; Sanipour *et al.*, 2022).

Y. Li & Bahrani (2021a, 2021b), Hamediazad & Bahrani (2022), Rógenes *et al.* (2022, 2023) e Sanipour *et al.* (2022) mencionam como principais vantagens do CVBM: a capacidade de representar o comportamento de rochas em laboratório, a extensibilidade do método a problemas em escalas de campo, o menor tempo de modelagem que permite um processo de calibração mais eficiente (quando comparado com os modelos discretos), a capacidade de capturar a envoltória de ruptura não linear das rochas intactas, a possibilidade de aproximar a

envoltória S do comportamento dos maciços rochosos e a sua implementação baseada no FEM amplamente estendido e utilizado em diferentes campos da engenharia.

De acordo com Ghazvinian *et al.* (2014) e Fabjan *et al.* (2015), empregar blocos Voronoi na modelagem das rochas permite considerar certo grau do imbricamento das partículas durante o processo de carregamento, minimizando a tendência na geração de trajetórias de ruptura cisalhantes. Adicionalmente, segundo Park *et al.* (2017), a utilização de blocos poligonais permite incorporar os efeitos de angularidade e rotação das particular que acontece ao interior das rochas reais.

O polígono Voronoi é definido como aquela região do espaço que surge do conjunto de pontos cuja distância euclidiana ao ponto de controle correspondente é menor que a distância a qualquer outro destes pontos. Os pontos de controle, ou sementes, são a nuvem de pontos localizados inicialmente de forma pseudoaleatória, de modo que os lados dos polígonos são gerados por aqueles pontos equidistantes das duas sementes contíguas mais próximas (Figura 3.1-c).

No CVBM, os blocos Voronoi estão divididos por uma malha de elementos finitos (elementos internos) que são os responsáveis de simular a deformabilidade dos minerais e o processo de fraturamento intragranular e transgranular quando adotado algum critério de ruptura (Figura 3.2).

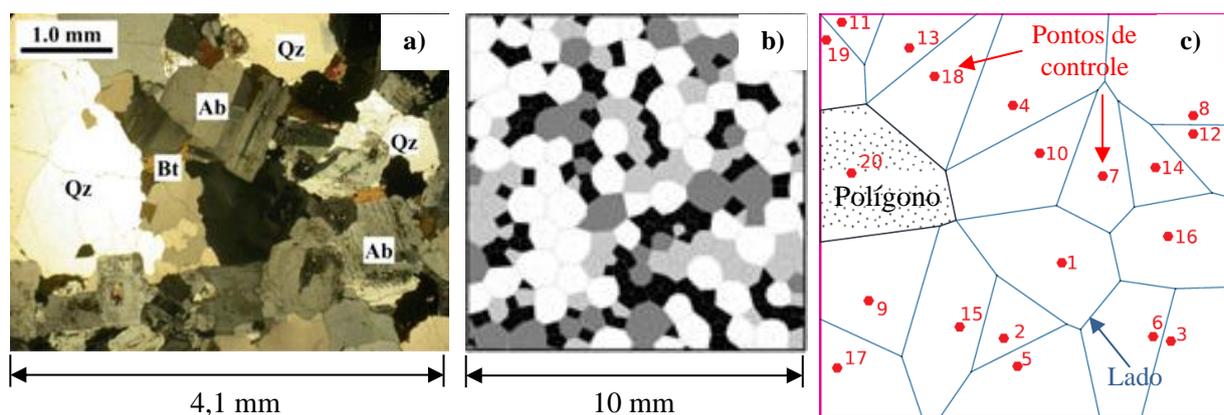


Figura 3.1. a) Microfotografia em luz polarizada do granito Hwangdeung e b) a sua representação numérica empregando polígonos Voronoi. Adaptado de Park *et al.* (2017). c) Elementos que conformam o diagrama de Voronoi formado a partir da nuvem de pontos de controle ou sementes. Modificado de Abdelaziz *et al.* (2018).

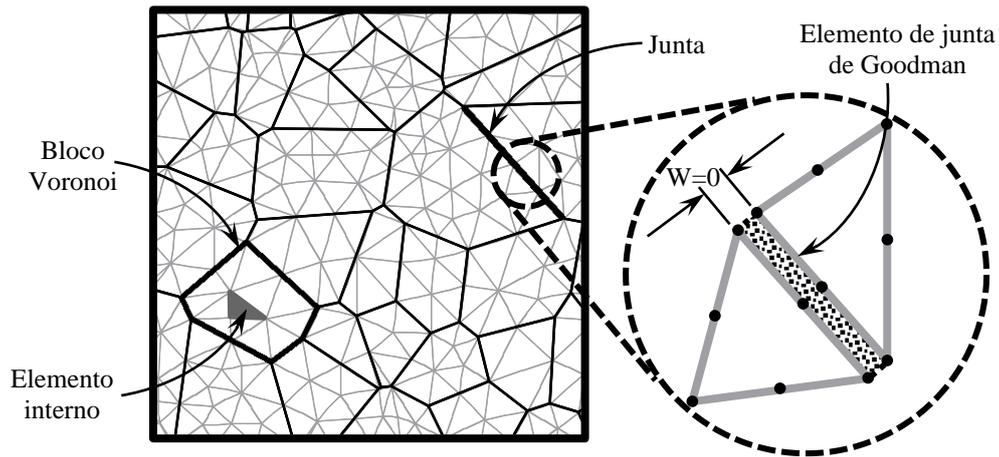


Figura 3.2. Entidades que compõem o modelo CVBM.

Os lados dos polígonos estão unidos por elementos de junta de Goodman (Goodman *et al.*, 1968) caracterizados por ter comprimento finito e espessura nula, apresentando parâmetros de deformabilidade e ruptura que permitem representar a criação e propagação de fraturas intergranulares. A interação gerada pelos elementos de junta não simboliza contatos propriamente ditos e a sua ruptura ou plastificação não provocam a mudança na continuidade do modelo, contrário ao que acontece nos modelos tipo FDEM.

3.2. PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS ELEMENTOS DO CVBM

Nesta pesquisa foram adotados blocos deformáveis com comportamento elástico-frágil-plástico (Figura 3.3) e critério de ruptura Mohr-Coulomb (M-C) para representar tanto a resistência de pico quanto a resistência residual. A elasticidade dos blocos é caracterizada pelos parâmetros convencionais usados nos modelos FEM, como o módulo de Young (E_v) e o coeficiente de Poisson (ν_v). Para as juntas, a deformabilidade está descrita por parâmetros de rigidez normal k_n e rigidez cisalhante k_s , que relacionam os acréscimos de forças normais ΔF_n e cisalhantes ΔF_s com os respectivos acréscimos de deslocamentos Δu_n e Δu_s a través das Equações 3.1 e 3.2:

$$\frac{\Delta F_n}{l \cdot 1} = k_n \Delta u_n \quad (3.1)$$

$$\frac{\Delta F_s}{l \cdot 1} = k_s \Delta u_s \quad (3.2)$$

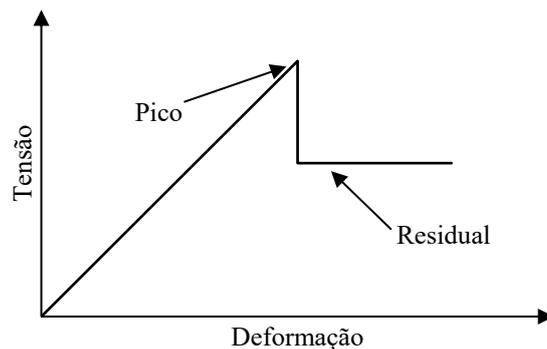


Figura 3.3. Comportamento elástico-frágil-plástico usado nos elementos internos e nos elementos de junta de Goodman.

sendo $l \cdot 1$ o comprimento do elemento de junta que multiplica a profundidade unitária assumida na análise em deformação plana. Quanto à resistência das juntas, foi adotado o mesmo comportamento usado nos blocos Voronoi. Na Tabela 3.1 apresenta-se o resumo dos parâmetros necessários para representar o comportamento de ambos os tipos de elementos.

O *software* RS2 possui duas opções na definição do comportamento dos extremos das juntas: a condição aberta, em que o extremo está representado por dois nós com movimentos independentes, e a condição fechada, em que o deslocamento relativo não está permitido já que o extremo está constituído por um único nó (Rocscience Inc, 2022). No CVBM, ambos os extremos da junta podem ser considerados de tipo aberto ou fechado, conseguindo no primeiro caso uma maior quantidade de graus de liberdade e a representação do movimento relativo entre blocos Voronoi (Figura 3.4).

Tabela 3.1. Parâmetros que definem o comportamento das entidades que integram o CVBM.

Bloco Voronoi	Juntas
Elasticidade	
Módulo de Young E_v	Rigidez normal k_n
Coefficiente de Poisson ν_v	Rigidez cisalhante k_s
Resistência de pico (M-C)	
Coesão de pico c_v	Coesão de pico c_j
Ângulo de atrito de pico ϕ_v	Ângulo de atrito de pico ϕ_j
Resistência à tração de pico T_v	Resistência à tração de pico T_j
Resistência residual (M-C)	
Coesão residual c_{rv}	Coesão residual c_{rj}
Ângulo de atrito residual ϕ_{rv}	Ângulo de atrito residual ϕ_{rj}
Resistência à tração residual T_{rv}	Resistência à tração residual T_{rj}
Ângulo de dilatação ψ_v	-

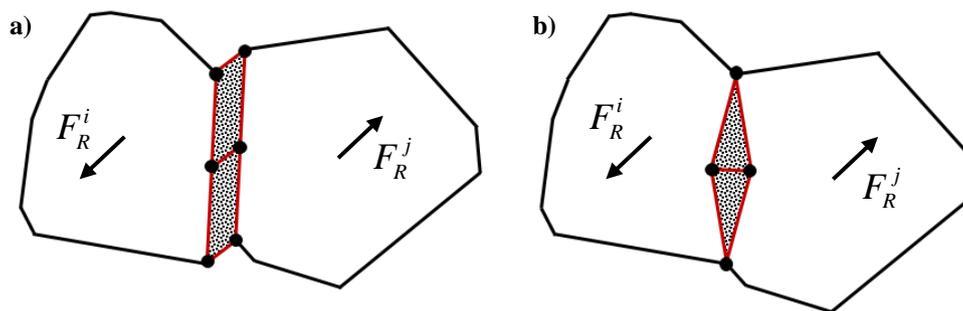


Figura 3.4. Definição de a) junta aberta e b) junta fechada para o CVBM no *software* RS2.

3.3. INTEGRAÇÃO DE OUTRAS FONTES DE HETEROGENEIDADE NO CVBM

Até agora, uma das limitações do *software* RS2 é a impossibilidade de atribuir de forma simples e aleatória diferentes valores das propriedades aos elementos que conformam o modelo. Desta forma, o CVBM só permite considerar a heterogeneidade geométrica causada pela estrutura dos blocos Voronoi utilizados.

O presente trabalho adiciona a heterogeneidade material e de contatos no CVBM, modificando os arquivos de entrada mediante o uso de um *script* implementado em Python (Anexo A). Uma dinâmica similar foi utilizada por Valley *et al.* (2010) para introduzir a heterogeneidade elástica e de resistência no modelo FEM convencional, dando a cada elemento da malha triangular um valor aleatório de cada propriedade empregando distribuições de probabilidade, conseguindo simular ensaios de compressão simples e triaxial.

Neste caso, foi adotada a abordagem usada nos GBMs com base no conteúdo mineralógico da rocha. O pseudo-código do *script* se mostra na Tabela 3.2, sendo necessário criar o modelo previamente no arquivo com extensão “.fea” definindo a geometria, a rede de juntas Voronoi desagrupada e a malha de elementos finitos. Cabe ressaltar que o código utilizado nesta pesquisa foi desenvolvido em conjunto com a versão 11.013 do RS2.

Com a introdução da heterogeneidade material e de contatos, os parâmetros apresentados na Tabela 3.1 devem ser definidos para cada tipo de mineral e junta. Foram criados diferentes tipos de juntas com propriedades que dependem dos materiais dos blocos unidos por elas.

Tabela 3.2. Pseudo-código do *script* usado para introduzir a heterogeneidade material e de contatos no CVBM.

-
- (1) **[Extração de Dados]** Leitura dos dados do arquivo “.fea” e definição do conteúdo mineralógico (MatPer).
 - (2) **[ID dos Elementos]** Identificação dos blocos Voronoi e das juntas.
 - (3) **[Área]** Cálculo da área de cada bloco Voronoi (VorArea) e de todo o modelo (TotalArea). Definição da área correspondente a cada tipo de mineral como MatPer*TotalArea.
 - (4) **[Material Voronoi]** Atribuição aleatória do mineral a cada bloco Voronoi. A soma da VorArea para cada mineral deve ser aproximadamente igual a MatPer*TotalArea.
 - (5) **[Tipo Junta]** Definição dos tipos de junta por combinatória (TypeJnt) baseada no número de minerais diferentes considerados.
 - (6) **[Material Junta]** Atribuição do TypeJnt a cada junta segundo os materiais dos blocos Voronoi unidos.
 - (7) **[Reescrita]** Modificação do arquivo “.fea” com a nova definição dos materiais para os blocos e juntas.
-

Os elementos de junta podem unir blocos do mesmo tipo de mineral (junta de Homofase) o de minerais diferentes (junta de Interfase). Assim, a quantidade de juntas diferentes m aumenta seguindo uma progressão triangular com relação ao número de minerais considerados no modelo n (Equação 3.3). Dado que o modelo agora inclui várias fontes de heterogeneidade, nas seções seguintes será denominado como “CVBM heterogêneo”.

$$m = \frac{n(n+1)}{2} \quad (3.3)$$

3.4. HIPÓTESES DO CVBM HETEROGÊNIO

Com o objetivo de tornar o CVBM heterogêneo uma opção prática para a análise do comportamento das rochas, foi realizada uma série de simplificações para reduzir o número de parâmetros a serem calibrados, respeitando a lógica do comportamento mecânico dos elementos quando submetidos a diferentes tipos de carregamentos.

Com relação aos parâmetros das juntas, uma estimativa inicial do valor de k_n pode ser obtida mediante a equação abaixo, sendo α um fator que pode variar entre 1 e 100 (tipicamente de 1 até 25), E o módulo de Young do material e l_e o comprimento médio dos elementos (Zhou *et al.*, 2016):

$$k_n = \frac{\alpha E}{l_e} \quad (3.4)$$

Normalmente, esta equação é empregada para calcular a rigidez normal dos contatos em simulações que usam o método FDEM (p. ex. Chang *et al.* (2014), Ma *et al.* (2014, 2016), Zhou *et al.* (2016)), porém, os valores obtidos são muito próximos aos utilizados em modelos já calibrados do tipo BBM, GBM e CVBM, como os apresentados por Lan *et al.* (2010), Chen & Konietzky (2014), Sinha & Walton (2020a), Y. Li & Bahrani (2021a) e Rógenes *et al.* (2022).

No CVBM heterogêneo, a relação 3.4 foi utilizada para definir a rigidez normal das juntas de Homofase k_n^i , considerando o módulo de Young E_v^i do tipo de mineral i atribuído aos blocos vizinhos e assumindo o diâmetro de partícula D_{50} do modelo como o comprimento médio dos elementos. Para todas as juntas de Homofase foi empregado o mesmo valor do fator α .

Por outro lado, alguns autores como Chen & Konietzky (2014) e Park *et al.* (2017), determinaram a rigidez normal do contato entre materiais diferentes com base na média aritmética dos valores correspondentes para cada tipo de mineral particular, podendo também ser adotado o menor valor ou aplicar a média ponderada em relação à porcentagem de conteúdo de cada mineral.

Neste trabalho foi adotado o cálculo por Média Ponderada, de forma que a rigidez normal de cada junta de Interfase k_n^{ij} foi obtida a partir dos valores k_n^i e k_n^j das juntas de Homofase correspondentes ao minerais i e j conectados. Desde o ponto de vista mecânico, esta hipótese indica que quanto maior a quantidade percentual de um mineral, maior será o impacto dos seus parâmetros no comportamento macroscópico da rocha, aproximando-se cada vez mais ao comportamento de um material homogêneo em que as interfaces estão caracterizadas por um único conjunto parâmetros mecânicos. Além disso, essa abordagem apresenta uma variante adicional aos métodos usados até agora.

Para determinar a rigidez cortante k_s de todas as juntas, foi empregada uma relação k_n / k_s constante, apresentando valores típicos na faixa de 1 até 20 (Chen & Konietzky, 2014; Fabjan *et al.*, 2015; Park *et al.*, 2017; Sinha & Walton, 2020a; Yanbo Zhang *et al.*, 2020).

Geralmente os trabalhos que incorporam a heterogeneidade material, definem os valores de rigidez e resistência dos contatos com base na resistência relativa entre minerais, adotando valores maiores para os contatos que conectam os materiais mais competentes. Para o CVBM

heterogêneo, a resistência das juntas foi caracterizada a partir de um mesmo conjunto de valores, independentemente do tipo de junta especificada, de igual forma que foi feito por Lan *et al.* (2010), Nicksiar & Martin (2014), Park *et al.* (2017) e Chung *et al.* (2019), de modo que a heterogeneidade e a ruptura dependem dos parâmetros elásticos de cada tipo de material. Segundo Sinha & Walton (2020a), adotar a heterogeneidade na resistência dos contatos parece ser menos relevante que representar a variabilidade elástica das partículas durante a simulação do processo de microfraturamento das rochas.

A mesma abordagem foi usada para definir os valores de resistência dos blocos Voronoi, utilizando um único conjunto de parâmetros para todos os tipos de minerais. Além disso, foram assumidos valores nulos de resistência à tração residual e coesão residual para os blocos e juntas, pelo que o comportamento logo da ruptura está caracterizado só pelo ângulo de atrito residual. O ângulo de dilatação dos blocos também foi considerado igual a zero, de forma que a dilatação acontecida no modelo será causada principalmente pelo deslocamento relativo entre blocos.

Por sua parte, a resistência a tração de pico das juntas T_j foi definida conforme os parâmetros da envoltória de M-C, por meio da seguinte equação:

$$T_j = \frac{c_j}{\tan \phi_j} \quad (3.5)$$

onde c_j e ϕ_j são a coesão de pico e o ângulo de atrito de pico das juntas, respectivamente. Essa relação provoca que durante a modelagem, a resistência a tração efetiva presente uma dependência da trajetória de tensões experimentada em cada caso, pelo que, na prática, a Equação 3.5 estabelece o valor máximo que pode ser atingido (Rógenes *et al.*, 2022).

Nas simulações foram empregados elementos internos e elementos de junta de seis nós (Figura 3.2), procurando uma melhor aproximação das tensões ao interior do material e a representação adequada das fraturas intragranulares e transgranulares. Do mesmo modo, o tamanho dos elementos internos deve ser suficiente para poder simular o processo de ruptura dos blocos. De acordo com os trabalhos de Fabjan *et al.* (2015), Sinha & Walton (2020a) e Rógenes *et al.* (2022), a relação entre o comprimento médio das juntas (\bar{l}_j) e o comprimento médio dos elementos internos (\bar{l}_m) deve estar faixa de 1,2 até 4, preferivelmente, a fim de garantir uma quantidade suficiente de graus de liberdade ao interior dos blocos Voronoi.

4. MODELAGEM DE ROCHAS NAS CONDIÇÕES DE CARREGAMENTO UCS E BTS

No presente capítulo serão avaliadas as capacidades do CVBM heterogêneo para representar o comportamento e fraturamento das rochas na escala de laboratório. A modo de exemplo, o modelo foi calibrado para simular os ensaios de compressão não confinada e de tração indireta executados sobre amostras de Diorito Äspö. Todos os modelos elaborados neste trabalho foram desenvolvidos num *desktop* com processador Intel® Core™ i7-X 980 a 3,33GHz e 24GB de RAM.

O Diorito Äspö é um dos grupos de rochas plutônicas predominantes na região de Oskarshamn, na Suécia, conformado principalmente por granitos, granodioritos e quartzo-monzonitos, que apresentam tonalidades entre cinza e cinza avermelhado, granulometria média e uma alta resistência à compressão simples (Lampinen, 2006).

Os diversos ensaios de campo e laboratório executados sobre estes tipos de rochas obedecem ao projeto de disposição final de resíduos nucleares levado a cabo pela companhia sueca SKB. Os resultados dos ensaios convencionais de compressão e tração, assim como as análises petrológicas, são usados nesta pesquisa como caso de estudo.

4.1. PROCEDIMENTO DE CALIBRAÇÃO

A calibração dos parâmetros do modelo foi realizada seguindo um procedimento iterativo, tomando como ponto de partida os dados reportados de elasticidade dos minerais e de resistência macroscópica da rocha simulada. Foram assumidos como valores de referência ou valores objetivo da calibração as resistências máximas de tração e compressão (BTS e UCS, respectivamente), as tensões características CI e CD, o módulo de Young macroscópico (E) e o coeficiente de Poisson macroscópico (ν), além de atender o tipo de ruptura acontecido experimentalmente.

Os parâmetros foram ajustados até que as propriedades macroscópicas do modelo estivessem dentro da faixa de erro de $\pm 5\%$ com relação aos valores objetivo. A Figura 4.1 mostra o diagrama de fluxo do processo de calibração adotado, levando em conta as observações apresentadas por Lan *et al.* (2010) e Farahmand & Diederichs (2015), e os procedimentos utilizados por Hamediazad & Bahrani (2022), Rógenes *et al.* (2022) e Sanipour *et al.* (2022) para a calibração do CVBM convencional.

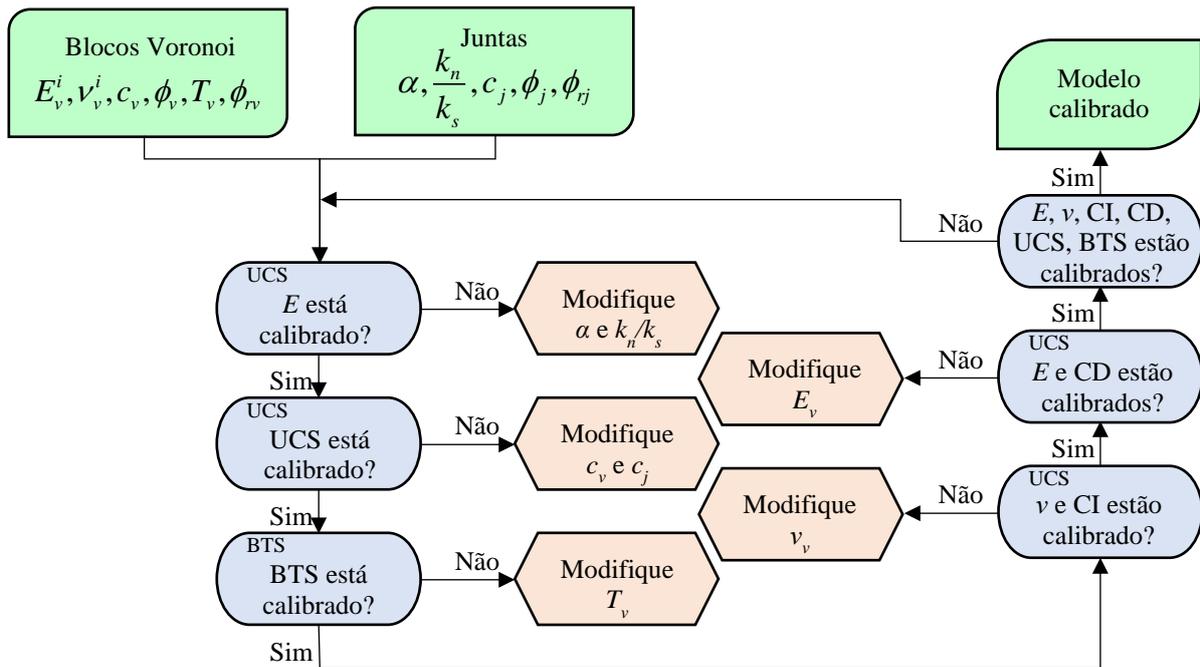


Figura 4.1. Diagrama de fluxo do processo de calibração do CVBM heterogêneo considerando as condições de carregamento UCS e BTS.

Por último, dependendo dos dados disponíveis na literatura, os modelos podem ser ajustados para retratar o comportamento médio da rocha ou representar um resultado particular de algum dos ensaios considerados.

4.2. ENSAIOS DE LABORATÓRIO DO DIORITO ÄSPÖ

O Diorito Äspö pode ser catalogado como uma rocha dura e frágil, com comportamento mecânico tipo II quando submetido ao estado de compressão simples, exibindo geralmente um tipo de ruptura por *axial splitting* (Figura 4.2-a). A rocha apresenta uma textura porfídica de grão médio, com cristais de K-Feldspato de tamanho consideravelmente maior que os demais (fenocristais). Na Figura 4.2-b se mostra um exemplo da textura geral da rocha, destacando a heterogeneidade geométrica e material na escala dos minerais.

Do trabalho de Staub *et al.* (2004) foi extraída a curva tensão-deformação para o ensaio UCS realizado sobre a amostra de KQ0064G01-6.26, também conhecida como U626 (Figura 4.3-a). Adicionalmente, foram geradas as gráficas de deformações volumétricas-deformação axial, ressaltando as tensões CI e CD definidas como os pontos de reversão das curvas correspondentes (Figura 4.3-b).

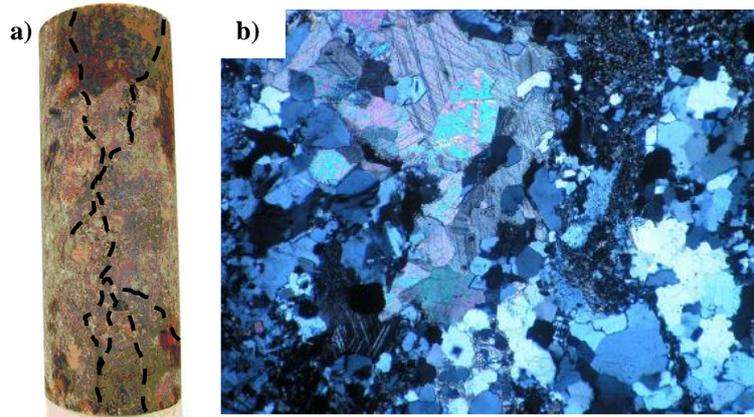


Figura 4.2. a) Amostra U626 de Diorito Äspö, destacando-se as fraturas acontecidas durante o ensaio UCS. Modificado de Staub *et al.* (2004). b) Fotografia em luz polarizada do Diorito Äspö, a largura da imagem equivale a 4 mm. Adaptado de Lampinen (2006).

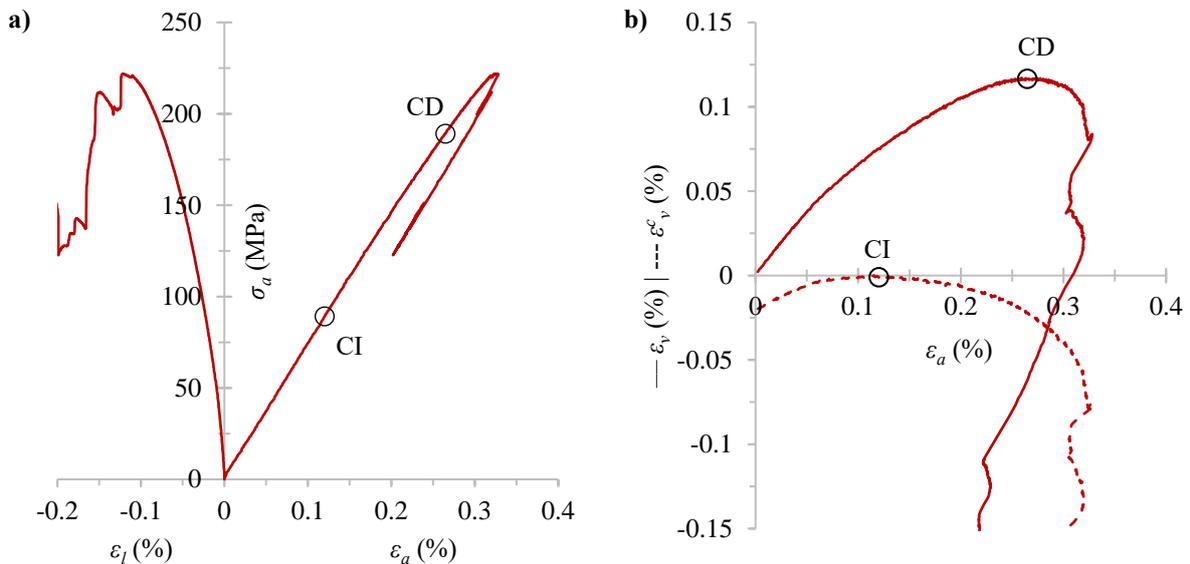


Figura 4.3. Resultados do ensaio UCS para a amostra U626 de Diorito Äspö, a) curva tensão-deformação (Adaptado de Staub *et al.* (2004)) e b) curvas deformações volumétricas-deformação axial.

Na Tabela 4.1 se faz o resumo das tensões características, resistência máxima e parâmetros elásticos (calculados para o 50% do UCS) obtidos do ensaio, além dos valores de resistência a tração indireta, coesão e ângulo de atrito reportados por Nordlund *et al.* (1999) e Staub *et al.* (2004). Dado que os valores calculados de E_{50} e ν_{50} podem estar influenciados pelo desenvolvimento das fraturas, também foram inclusos os parâmetros iniciais de módulo de Young E_0 e coeficiente de Poisson ν_0 .

Com base nas análises de lâmina delgada, Lampinen (2006) e Lan *et al.* (2010) apresentaram os resultados de conteúdo e distribuição granulométrica dos minerais da rocha, sendo resumidos na Tabela 4.2 e na Figura 4.4, respectivamente. Nesta figura, o diâmetro de partícula foi obtido para aquele círculo de área equivalente à do mineral analisado.

Tabela 4.1. Parâmetros elásticos e tensões características do ensaio de compressão não confinada. Valores obtidos de Nordlund *et al.* (1999) e Staub *et al.* (2004).

Parâmetro	Valor	Tensões	Valor
E_0 / E_{50} (GPa)	73,6/73,6	BTS (MPa)	14,9
ν_0 / ν_{50}	0,22/0,27	CI (MPa)	89,2
ϕ (°)	49	CD (MPa)	189,2
c (MPa)	31	UCS (MPa)	222,1

Tabela 4.2. Composição mineralógica do Diorito Äspö reportada por Lampinen (2006).

Mineral	Composição lab (%)
Plagioclásio (P)	41-46
K-Feldspato (F)	11-12
Quartzo (Q)	15-21
Biotita/Clorita (BC)	14-16
Calcita	7
Epidoto	4-6
Titanita	1-2

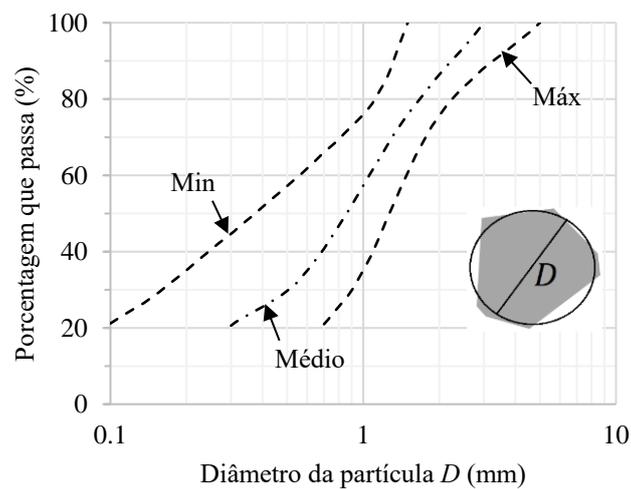


Figura 4.4. Faixa granulométrica para o Diorito Äspö. Digitalizado de Lan *et al.* (2010).

4.3. GERAÇÃO DOS MODELOS

Durante o processo de calibração, tentou-se representar explicitamente o comportamento da amostra U626 submetida ao ensaio de compressão simples, entretanto, a resistência a tração por compressão diametral foi simulada procurando reproduzir a média dos valores obtidos experimentalmente. Na criação dos modelos numéricos, foram considerados os quatro tipos de minerais essenciais que compõem a rocha nas porcentagens listadas na Tabela 4.3, gerando um total dez tipos de juntas diferentes, quatro de Homofase e seis de Interfase.

A fim de estabelecer a influência da estrutura dos blocos Voronoi e a disposição espacial dos materiais sobre o processo de ajuste, foram levadas a cabo as calibrações para dois conjuntos de modelos com a geometria e as condições de contorno mostradas na Figura 4.5. Nesta figura é apresentada a configuração interna dos minerais usado nos corpos de prova que conformam a “Calibração 1”. Modelos com igual geometria e estrutura interna diferente foram gerados para a “Calibração 2”.

A estrutura de blocos Voronoi foi criada usando o próprio algoritmo do RS2 na configuração irregular, adotando um comprimento médio das juntas (\bar{l}_j) de 1,05 mm. Na Figura 4.6 se comparam as distribuições granulométricas dos modelos UCS com as faixas obtidas experimentalmente. O valor de \bar{l}_j escolhido permite que o D_{50} dos modelos sejam aproximadamente duas vezes o valor correspondente ao da distribuição média de laboratório. Modelos com tamanhos de partículas maiores já tem sido calibrados satisfatoriamente por Lan *et al.* (2010) e Nicksiar & Martin (2014), uma vez que o comportamento pré-pico não tem se visto influenciado significativamente.

Seguidamente da geração dos blocos, foi empregada a opção de “*Geometry cleanup*” integrada no *software*, a fim de eliminar aqueles lados dos polígonos que apresentam pequenas dimensões, evitando a geração de elementos internos de pouca qualidade que puderam impactar negativamente nas simulações. Um procedimento similar tem sido utilizado por Ghazvinian *et al.* (2014) e Abdelaziz *et al.* (2018).

Na Figura 4.6 também são apresentados os valores de Coeficiente de graduação (S_o) dos modelos e da curva média experimental, definido segundo a Equação 4.1 (Nicksiar & Martin, 2014):

$$S_o = \sqrt{\frac{D_{75}}{D_{25}}} \quad (4.1)$$

sendo D_{75} e D_{25} os diâmetros de partícula para os quais passa o 75% e o 25% dos minerais, respectivamente. Os resultados indicam que, mesmo usando a configuração irregular na definição da rede de juntas, o algoritmo não consegue reproduzir a variedade de tamanho dos minerais da rocha, resultando em distribuições quase uniformes descritos por valores de S_o mais próximos de um.

Tabela 4.3. Composição mineralógica adotada nos modelos numéricos do Diorito Äspö.

Mineral	Composição lab (%)	Modelos (%)
Plagioclásio (P)	41-46	49
K-Feldspato (F)	11-12	13
Quartzo (Q)	15-21	22
Biotita/Clorita (BC)	14-16	16

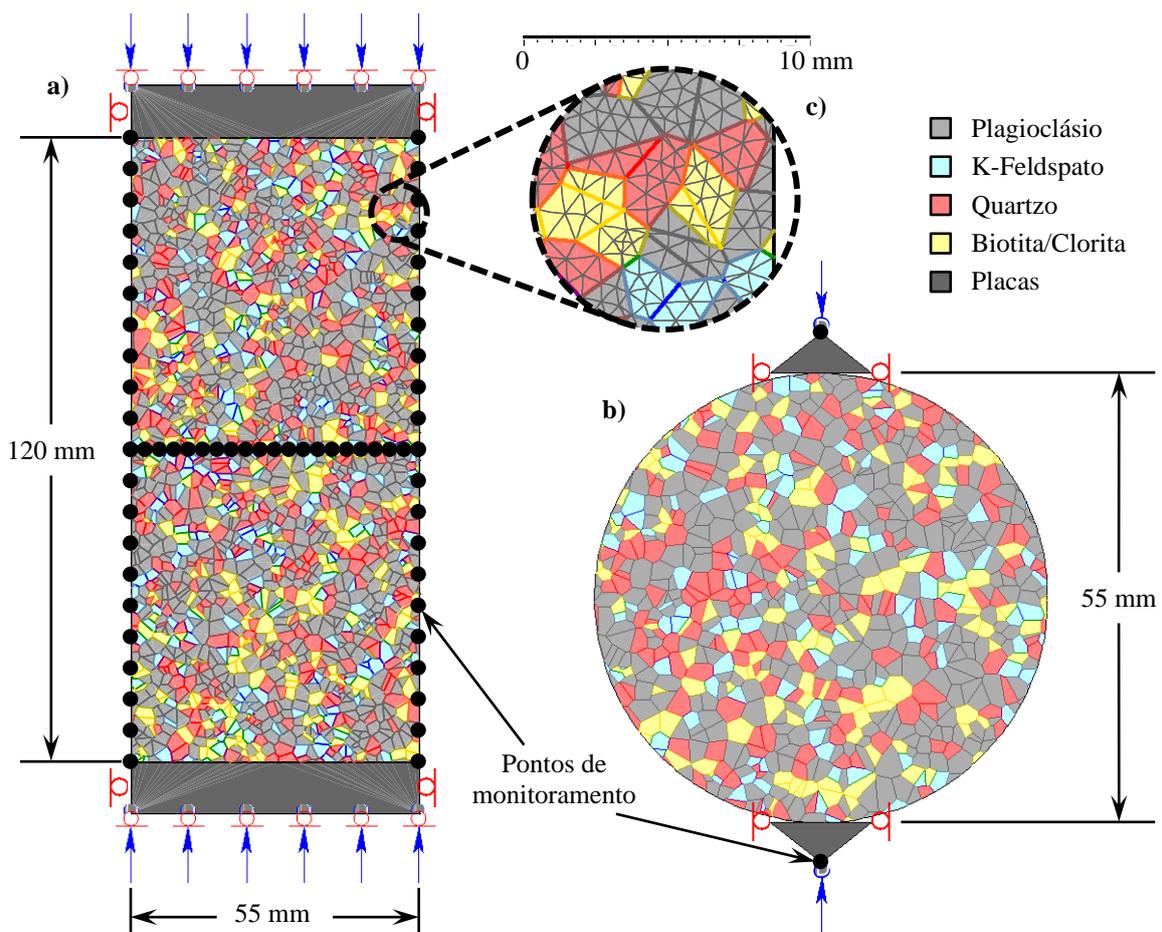


Figura 4.5. Corpos de prova gerados para a Calibração 1, a) modelo do ensaio UCS e b) modelo do ensaio BTS. c) Detalhe dos elementos internos que conformam os blocos Voronoi.

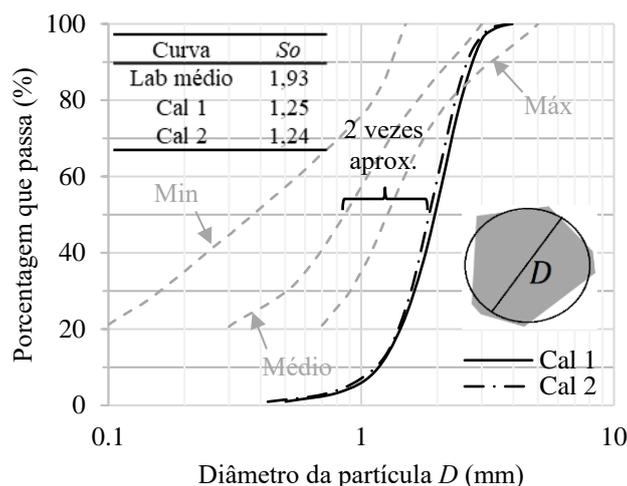


Figura 4.6. Distribuições granulométricas dos modelos UCS usados na representação do Diorito Äspö.

Foi adotado um valor de \bar{l}_j / \bar{l}_m igual a 1,3 para todos os modelos usados nas calibrações, obtendo na média 14 elementos internos por bloco. Na Figura 4.5-c se mostra o detalhe da divisão dos blocos Voronoi conforme a configuração utilizada. Nas seções seguintes a relação \bar{l}_j / \bar{l}_m será usado como parâmetro para a análise da dependência do modelo com relação ao tamanho da malha.

Em resumo, o número total de blocos Voronoi, elementos internos e juntas para o modelo de compressão simples foi de 1998, 29181 e 5753, respectivamente, e para o modelo de tração indireta: 788, 10804 e 2187, correspondentes à Calibração 1. Valores similares foram obtidos para os modelos da Calibração 2 (UCS: 2185 blocos, 28857 elementos internos e 6261 juntas; BTS: 760 blocos, 11084 elementos internos e 2138 juntas).

As placas de carregamento foram simuladas como materiais perfeitamente elásticos com os parâmetros $E = 200\text{GPa}$ e $\nu = 0,33$. O contato com o corpo de prova foi representado por uma junta aberta com rigidez normal de 10^{15}MPa/m , rigidez cortante de 10^{-15}MPa/m e ângulo de atrito de pico de $0,0001^\circ$, garantindo a transferência de carregamento apenas na direção normal. No caso do ensaio de tração indireta, o contato entre as placas e a amostra forma um setor circular de 5° com referência ao centro do cilindro, seguindo a sugestão apresentada pela norma ASTM D3967-08 (2016). O deslocamento total das placas foi dividido em 50 estágios, provocando em cada um deles um acréscimo de deformação de 0,008% e 0,007% nos corpos

de prova para os modelos UCS e BTS, ficando dentro da faixa de velocidades recomendadas por Sanipour *et al.* (2022).

Para a obtenção das tensões e deformações dos corpos de prova, foram definidos pontos de monitoramento representados pelos círculos pretos na Figura 4.5. No ensaio de compressão não confinada, a tensão vertical foi calculada como a média dos valores medidos nos pontos localizados na metade da altura da amostra. A deformação lateral foi obtida da média dos deslocamentos horizontais dos pontos situados nas laterais e a deformação vertical foi estipulada a partir da média dos deslocamentos verticais dos pontos em contato com as placas de carregamento. No ensaio BTS, a tensão de tração foi calculada com base na equação:

$$\sigma_t = \frac{2F_v}{\pi t D_{CP}} \quad (4.2)$$

onde F_v é a média das forças verticais nos pontos de monitoramento, D_{CP} é o diâmetro do corpo de prova e t é a espessura da amostra assumida unitária para todos os modelos.

Dado que o CVBM não permite considerar a presença de vazios nem uma abertura inicial das juntas, não é possível simular a zona de fechamento de fraturas pré existentes, pelo que o valor da tensão CI foi determinado a partir do ponto de aceleração das deformações volumétricas das fraturas. Igualmente, os parâmetros elásticos iniciais foram assumidos como os valores objetivo da calibração. Já a tensão de dano por fraturas foi estabelecida como o ponto de reversão das deformações volumétricas totais, como foi mencionado na Seção 2.1.

Como ponto de partida do processo de calibração, foram adotados valores dos parâmetros elásticos para cada um dos minerais com base nos valores reportados por Bass (1995) e Batzle *et al.* (2006) (Tabela 4.4). A resistência de pico para os blocos e as juntas foi estabelecida conforme os valores de resistência macroscópica da rocha (Tabela 4.1) e o ângulo de atrito residual foi assumido como o 80% do valor de pico.

Tabela 4.4. Parâmetros de elasticidade dos minerais considerados inicialmente nos modelos segundo Bass (1995) e Batzle *et al.* (2006).

Mineral	E_v (GPa)	ν_v
Plagioclásio	89,3	0,26
K-Feldspato	73	0,31
Quartzo	94,4	0,08
Biotita/Clorita	34,7	0,39

4.4. RESULTADOS

A seguir, são apresentados os resultados obtidos durante as diferentes etapas do processo de calibração, começando pelo estudo da influência de cada um dos parâmetros sobre o comportamento macroscópico do modelo. Logo, mostram-se os valores explícitos das propriedades que permitiram calibrar o CVBM heterogêneo para representar a resposta do Diorito Äspö na escala de laboratório, aprofundando na análise do processo de fraturamento e do tipo de falha acontecida. Por último, são examinadas algumas questões surgidas durante o procedimento de ajuste, complementando a informação sobre as hipóteses e o funcionamento do modelo.

4.4.1. Parâmetros relevantes no processo de calibração

A influência dos parâmetros de deformabilidade das juntas (α e a relação k_n/k_s) sobre a resposta elástica macroscópica dos modelos UCS se evidencia nas Figuras 4.7 e 4.8. Nota-se que foram representadas as tendências de ambas as calibrações, além de avaliar o comportamento para valores de k_n/k_s menores aos recomendados. Durante esta primeira etapa do processo, foram adotadas resistências elevadas para os blocos e juntas a fim de garantir o desenvolvimento do trecho elástico na resposta do material. A proximidade das famílias de curvas revela um efeito mínimo da disposição dos minerais sobre a elasticidade resultante, especialmente para valores de α menores a 5, onde o desempenho das juntas permite uma maior interpenetração dos blocos.

As curvas da Figura 4.7 expõem a relação direta entre o módulo de Young inicial e a rigidez normal das juntas, independentemente do valor de k_n/k_s utilizado, mostrando uma tendência de estabilização quando o fator de α aumenta. Nesta condição, a deformabilidade dos blocos passa a dominar o comportamento elástico do modelo, atingindo valores limites diferentes por causa da disposição espacial dos materiais e da geometria dos polígonos Voronoi.

Mesmo assim, os valores máximos parecem próximos entre si e com respeito à média ponderada dos módulos de Young de cada mineral, calculada com base na composição adotada no modelo (79,6 GPa), sugerindo a semelhança com um sistema de molas acopladas em paralelo.

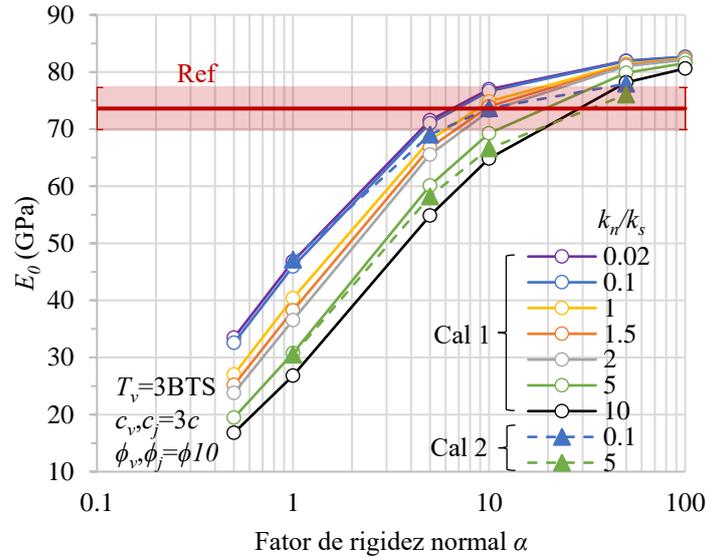


Figura 4.7. Módulo de Young inicial macroscópico em função do parâmetro α e da relação k_n/k_s . O valor de referência se mostra com uma banda erro de $\pm 5\%$.

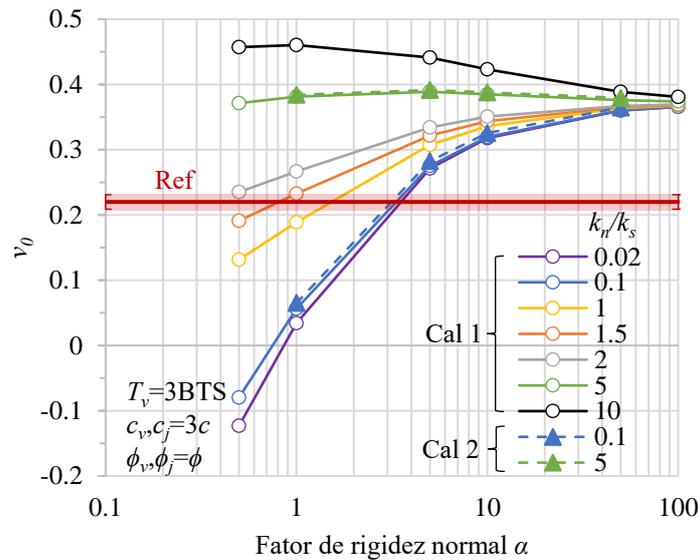


Figura 4.8. Coeficiente de Poisson inicial macroscópico em função do parâmetro α e da relação k_n/k_s . O valor de referência se mostra com uma banda erro de $\pm 5\%$.

Independentemente do valor de α , com um aumento do valor de k_n/k_s , o módulo de Young diminui e o coeficiente de Poisson aumenta, isto obedece ao fato de que uma grande parte das juntas estão submetidas a deslocamentos do tipo cisalhante devido a sua orientação com relação à direção de carregamento, de modo que a perda de rigidez respectiva permite uma maior

deformabilidade do material. Igualmente, o coeficiente de Poisson inicial apresenta uma disposição parecida quando o parâmetro α cresce, mostrando uma tendência de ambas calibrações para o mesmo valor de 0,37 (Figura 4.8). Entretanto, o modelo mostra um comportamento diferenciado para as relações k_n/k_s menores e maiores que cinco.

A variabilidade do coeficiente de Poisson com o valor de α para os diferentes k_n/k_s parece mais complexa. Na análise das curvas tensão-deformação, as deformações laterais têm um comportamento variado em torno ao valor de $k_n/k_s = 1$. Quando a rigidez cisalhante é maior que a normal ($k_n/k_s < 1$), as deformações laterais aumentam rapidamente conforme o acréscimo no valor de α , já para $k_n/k_s = 1$ as deformações laterais parecem ser independentes do valor de α e finalmente, para k_n/k_s maiores que um, as deformações laterais começam a diminuir com acréscimo do valor de α (Figura 4.9).

Neste ponto, para $k_n/k_s = 5$, o coeficiente de Poisson permanece quase constante apesar do acréscimo no valor de α . Este comportamento pode ser causado pelas condições particulares dos modelos, no entanto, valores de k_n/k_s menores que cinco são recomendados para o CVBM heterogêneo.

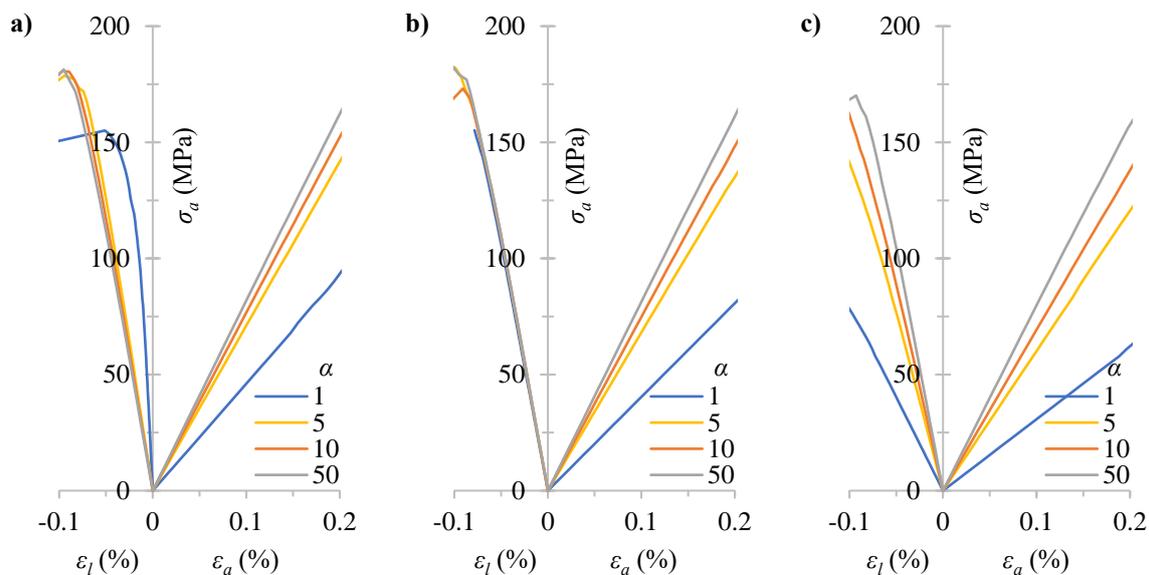


Figura 4.9. Comportamento elástico das curvas tensão-deformação com o aumento de α para diferentes valores de k_n/k_s . a) $k_n/k_s = 0,1$, b) $k_n/k_s = 1$, c) $k_n/k_s = 5$.

Das Figuras 4.7 e 4.8, se percebe uma incompatibilidade entre as propriedades de deformabilidade das juntas que permitem ajustar a resposta elástica dos modelos. Enquanto que para representar o módulo de Young E_0 , o parâmetro α pode adotar valores entre 5 e 50 para diferentes relações de rigidezes, o coeficiente de Poisson ν_0 só pode ser conseguido quando $\alpha < 4$. Neste caso foi priorizada a calibração do módulo E_0 , assumindo valores de k_n/k_s e α iguais a 0,1 e 6,5, respectivamente. O ajuste do coeficiente de Poisson, foi feito em etapas posteriores, modificando os valores iniciais de ν_v .

Adotar um valor de k_n/k_s menor que a unidade implica uma maior susceptibilidade das juntas a romper por cisalhamento, permitindo ativar tensões de tração nas juntas vizinhas. Deste modo, os elementos de junta passam a ter uma maior participação no processo de fraturamento.

Para avaliar o impacto dos parâmetros de resistência dos blocos e das juntas c_v, T_v e c_j durante a calibração simultânea das tensões de pico UCS e BTS, foram utilizados múltiplos dos valores obtidos nos ensaios de laboratório. Assim, foram considerados três níveis para cada variável, gerando as envoltórias representadas pelas linhas cinzas tracejadas mostradas na Figura 4.10. A análise dos resultados de compressão simples permite estabelecer as seguintes observações (Figura 4.11):

- Quando a coesão de pico dos blocos é equivalente à obtida dos resultados de laboratório, a ruptura do corpo de prova acontece rapidamente e de modo independente do valor de resistência à tração, portanto, o comportamento é dominado pela envoltória de ruptura de M-C. As fraturas desenvolvidas no corpo de prova ocorrem principalmente pela plastificação dos minerais, sem aparição de fraturas intergranulares significativas.
- Para uma coesão de pico dos blocos igual ao dobro do valor experimental, as tensões máximas atingidas são maiores que as conseguidas no item anterior. O incremento no valor de T_v provoca uma redução do número de blocos plastificados e promove o desenvolvimento de rupturas por cisalhamento. Quando a envoltória de M-C das juntas fica embaixo daquela que representa a resistência dos minerais, uma grande quantidade de elementos de junta atingem a ruptura antes da tensão de pico macroscópica, dominando o comportamento global do modelo. No entanto, se a resistência das juntas for maior, a resposta do material continua dependendo das propriedades dos blocos.

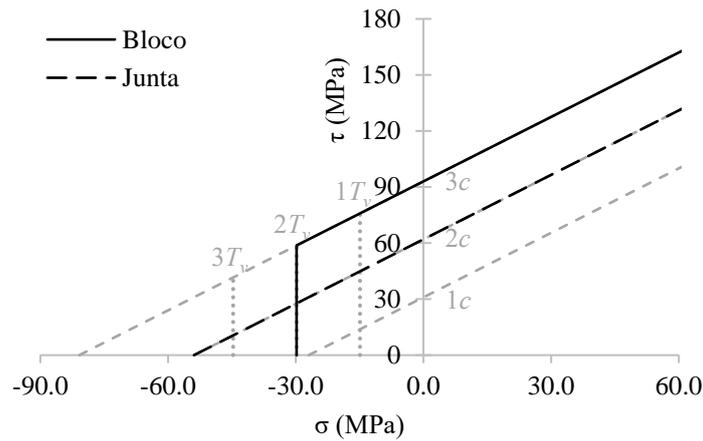


Figura 4.10. Envoltórias de ruptura de M-C geradas na análise do efeito de c_v , c_j e T_v (linhas cinzas), e usadas no modelo calibrado (linhas pretas).

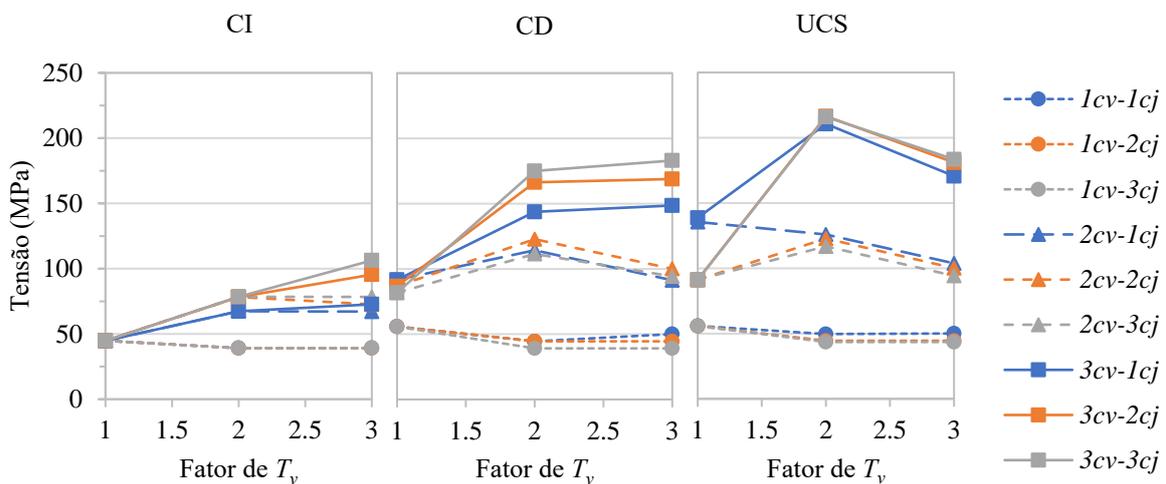


Figura 4.11. Efeito dos parâmetros c_v , T_v e c_j nas tensões características do ensaio de compressão simples.

- Por último, para um c_v igual a três vezes o valor teórico, foram alcançadas resistências maiores que nos dois casos anteriores, ocorrendo também a redução do número de blocos rompidos quando o parâmetro T_v aumenta. Neste cenário, a envoltória de resistência das juntas é menor o igual à dos minerais, passando a ter um maior protagonismo no comportamento macroscópico do material. Adicionalmente, conforme a coesão das juntas aumenta, uma menor quantidade de fraturas intergranulares são desenvolvidas, causando a falha por cisalhamento através dos blocos Voronoi.

Os resultados dos modelos de tração indicam uma dependência direta da tensão máxima com o valor de T_v considerado. Do mesmo modo, quando a coesão de pico das juntas é menor que à dos blocos, as fraturas intergranulares conseguem um maior desenvolvimento à medida que a resistência a tração dos minerais aumenta. Finalmente, os valores de $c_v = 3c$, $c_j = 2c$ e $T_v = 2BTS$, que definem as envoltórias representadas pelas linhas pretas na Figura 4.10, foram escolhidos por permitir uma melhor aproximação dos parâmetros de referência e do tipo de falha acontecido experimentalmente.

Nota-se que no processo de calibração da Figura 4.1, os ângulos de atrito de pico e residual de todos os elementos foram mantidos constantes. Mesmo assim, analisando a influência destes fatores no ensaio de compressão simples, observou-se que as tensões CD e máxima apresentam um leve incremento com o acréscimo de ϕ_{rv} , ϕ_j e ϕ_{rj} , enquanto a tensão CI ficou praticamente constante. No entanto, valores mais elevados do ângulo ϕ_v provocam uma redução drástica da resistência do material, como resultado do crescente domínio da envoltória de M-C na região de tração. Para terminar, a mudança nos parâmetros de resistência não gerou alterações na elasticidade macroscópica dos modelos, uma vez especificados os valores das propriedades E_v^i , ν_v^i , α e k_n/k_s .

Finalmente, avaliou-se o impacto da alteração dos coeficientes de Poisson dos minerais sobre os resultados dos ensaios simulados. Neste caso, foi adotado um fator de minoração aplicado a todos os parâmetros de ν_v , obtendo os gráficos apresentados nas Figuras 4.12 e 4.13. O efeito direto no coeficiente de Poisson macroscópico é evidente, acontecendo também uma leve redução do valor de E_0 conforme o fator utilizado decresce. Entretanto, as tensões CI, CD e BTS experimentam um aumento considerável para os menores fatores analisados.

Este comportamento é causado pela redução das tensões de tração geradas ao interior do material como resultado das deformações laterais experimentadas pelos diferentes tipos de partículas, afetando o início do processo de fraturamento (Figura 4.13-b). Contudo, a resistência à compressão não tem se visto alterada significativamente, podendo indicar uma maior relevância da estrutura dos minerais na determinação da tensão máxima para esta condição particular de carregamento.

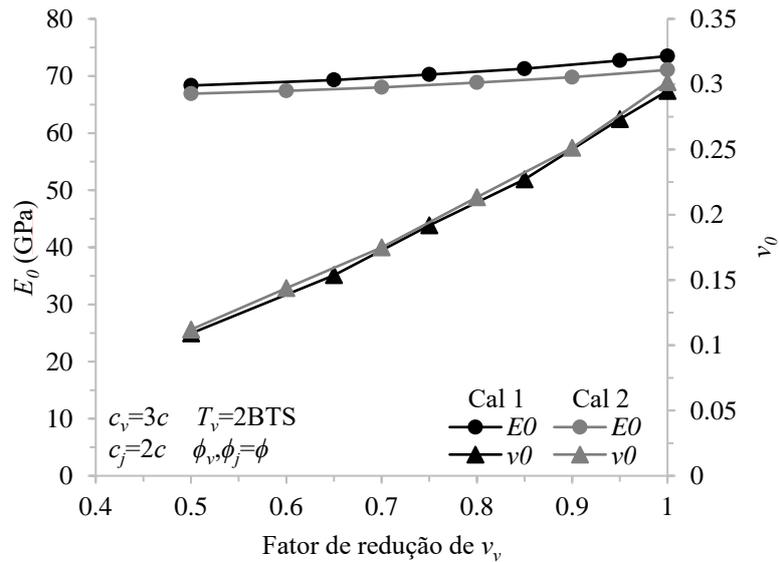


Figura 4.12. Efeito do fator de redução de ν_v na resposta elástica dos modelos UCS.

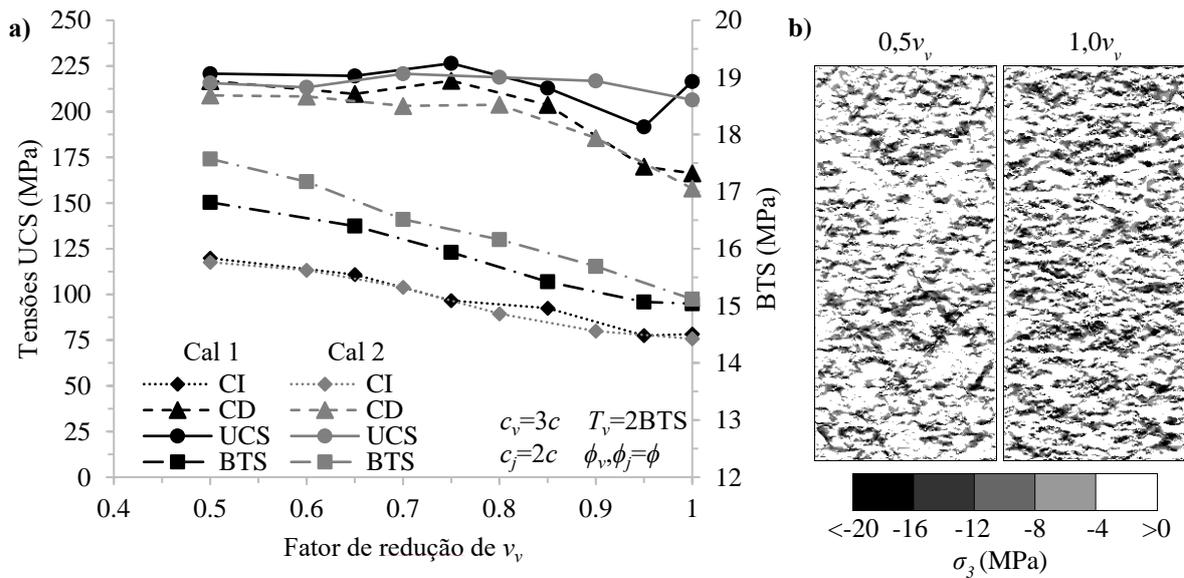


Figura 4.13. a) Influência do fator de redução de ν_v nas tensões dos modelos. b) Tensões de tração desenvolvidas nas amostras com diferentes valores do fator de redução para o estágio 30 ($\epsilon_a=0,23\%$).

4.4.2. Resultados da calibração

Nas Tabelas 4.5 a 4.7 são resumidos os parâmetros ajustados para as duas tentativas de calibração, notando apenas diferenças na resistência à tração de pico dos blocos e nos fatores

aplicados aos valores de E_v e ν_v . A relação k_n/k_s conseguida em ambos os casos encontrasse fora da faixa recomendada para modelos discretos, devido, provavelmente, às diferentes simplificações adotadas durante o procedimento de ajuste. No entanto, o valor escolhido permite mitigar as alterações feitas sobre os parâmetros de elasticidade dos blocos, além de favorecer a aparição de fraturas intergranulares nas primeiras etapas do processo de ruptura, concordando com as observações feitas por Eberhardt *et al.* (1999) e Wan & Li (2022).

Em geral, o CVBM heterogêneo conseguiu representar a resposta do Diorito Äspö até a tensão máxima para os dois tipos de ensaios simulados (Figuras 4.14 e 4.15), atingindo os parâmetros macroscópicos de referência dentro da faixa de aceitabilidade considerada (Tabela 4.8). Claramente, o comportamento pós-pico não foi capturado devido às condições de contorno impostas nos modelos, porém, a ruptura frágil concorda com a resposta geral das rochas tipo II nestas condições de carregamento (Wawersik & Fairhurst, 1970).

Tabela 4.5. Parâmetros elásticos calibrados para os blocos Voronoi.

Mineral	Inicial		Calibração 1		Calibração 2	
	E_v (GPa)	ν_v	E_v (GPa)	ν_v	E_v (GPa)	ν_v
Plagioclásio	89,3	0,26	90,2	0,22	91,1	0,22
K-Feldspato	73,0	0,31	73,7	0,26	74,5	0,26
Quartzo	94,4	0,08	95,3	0,07	96,3	0,07
Biotita/Clorita	34,7	0,39	35,0	0,33	35,4	0,32
Fator	-	-	1,01	0,85	1,02	0,83

Tabela 4.6. Parâmetros de resistência calibrados com base nos modelos UCS e BTS.

Elemento	Parâmetro	Calibração 1/Calibração 2	
		Valor	Fator ^a
Blocos Voronoi	c_v (MPa)	93/93	3/3
	ϕ_v (°)	49/49	1/1
	T_v (MPa)	29,8/28,3	2/1,9
	c_{rv} (MPa)	0 ^b	-
	ϕ_{rv} (°)	39	0,8 ^b
	T_{rv} (MPa)	0 ^b	-
	ψ_v (°)	0 ^b	-
Juntas	c_j (MPa)	62/62	2/2
	ϕ_j (°)	49/49	1/1
	T_j (MPa)	53,9 ^b /53,9 ^b	3,62 ^c /3,62 ^c
	c_{rj} (MPa)	0 ^b	-
	ϕ_{rj} (°)	39	0,8 ^b
	T_{rj} (MPa)	0 ^b	-

^aFator com relação ao valor de laboratório

^bProduto das simplificações adotadas

^cDepende de outros parâmetros

Tabela 4.7. Parâmetros elásticos calibrados para as juntas.

Junta	Calibração 1 e 2		
	k_n (MPa/m)	α	k_n/k_s
P-P ^a	2,96E+08	6,5	
P-F	2,85E+08	-	
P-Q	3,01E+08	-	
P-BC	2,52E+08	-	
F-F ^a	2,42E+08	6,5	
F-Q	2,87E+08	-	
F-BC	1,72E+08	-	
Q-Q ^a	3,13E+08	6,5	
Q-BC	2,30E+08	-	
BC-BC ^a	1,15E+08	6,5	
Todas as juntas	-	-	0,10

P – Plagioclásio, F – K-Feldspato, Q – Quartzo, BC – Biotita/Clorita
^aJunta de Homofase

O processo de fraturamento experimentados pelos modelos UCS para as Calibrações 1 e 2 se mostra nas Figuras 4.16 e 4.17, respectivamente, sem a representação das deformações experimentadas pelos corpos de prova a fim de localizar adequadamente os tipos de juntas plastificadas. Nessas figuras foram analisados os estágios onde se determinaram as tensões características, a tensão de pico e a condição residual subsequente, exibindo os elementos de juntas plastificados e identificando o tipo de ruptura atingida pelos elementos internos que conformam os blocos Voronoi.

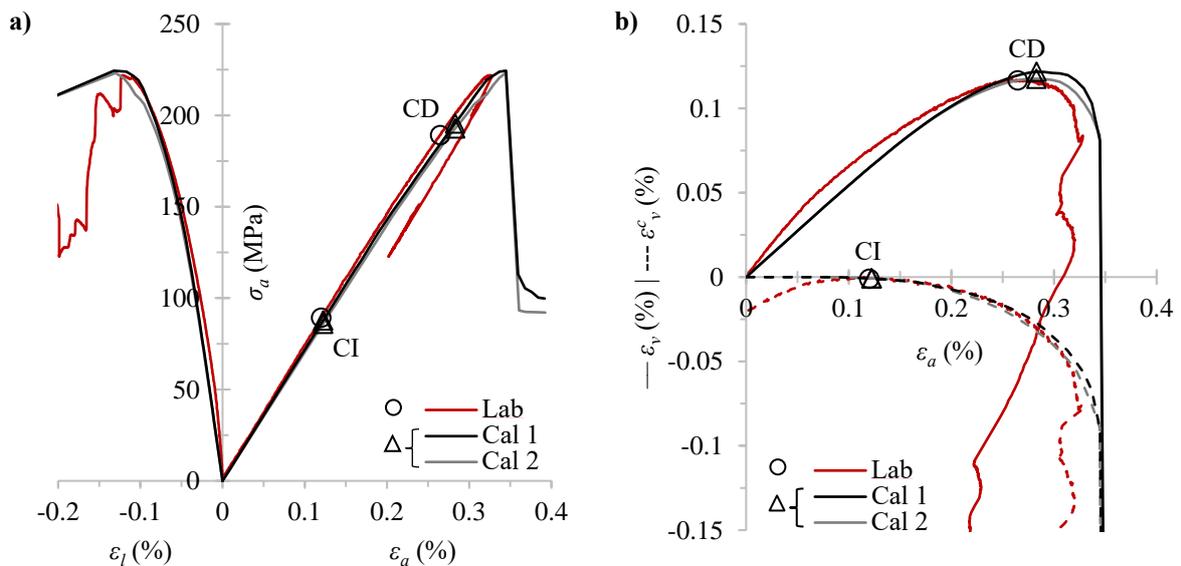


Figura 4.14. a) Curva tensão-deformação e b) curvas de deformação volumétrica total e das fraturas para ambas as tentativas de calibração, comparadas com o resultado experimental.

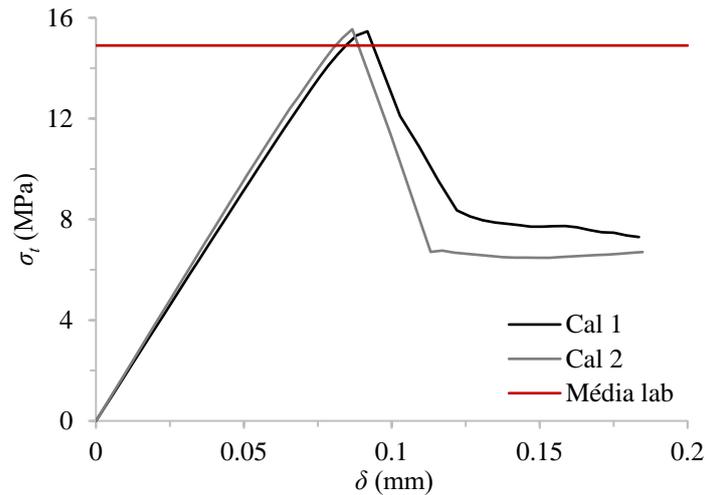


Figura 4.15. Curvas tensão de tração-deslocamento para os dois modelos BTS.

Tabela 4.8. Parâmetros macroscópicos dos modelos para ambas as calibrações.

Propriedade	Lab	Cal 1	Erro (%)	Cal 2	Erro (%)
<i>Elasticidade</i>					
E_0 (GPa)	73,6	71,9	-2,33	70,4	-4,33
ν_0	0,22	0,227	2,98	0,227	3,02
E_{50} (GPa)	73,6	71,7	-2,58	69,9	-5,03
ν_{50}	0,27	0,240	-11,11	0,240	-11,11
<i>Tensões características e de pico</i>					
BTS (MPa)	14,9	15,5	3,77	15,5	4,34
CI (MPa)	89,2	87,8	-1,62	85,9	-3,66
CD (MPa)	189,2	195,6	3,37	192,8	1,92
UCS (MPa)	222,1	224,4	1,05	223,2	0,49

Adicionalmente, foram plotados os cômputos dos elementos internos e de junta danificados, especificando o tipo de material correspondente para cada caso. Acima de cada barra foram especificadas as porcentagens de elementos rompidos com base na quantidade total presente no modelo.

Qualitativamente, o modo de ruptura acontecido nas simulações apresenta semelhanças com o tipo de fraturamento experimentado pela amostra U626 (Figura 4.2-a). O início das fraturas acontece naquelas juntas que apresentam uma direção próxima à de aplicação do carregamento, ocorrendo a plastificação de alguns dos elementos contíguos aos extremos das fraturas, apresentando o desenvolvimento das conhecidas como “wing cracks”. Nota-se que as porcentagens de elementos de junta plastificados é maior que os valores relacionados aos elementos internos, de forma que as fraturas intergranulares governam as etapas iniciais do processo de ruptura.

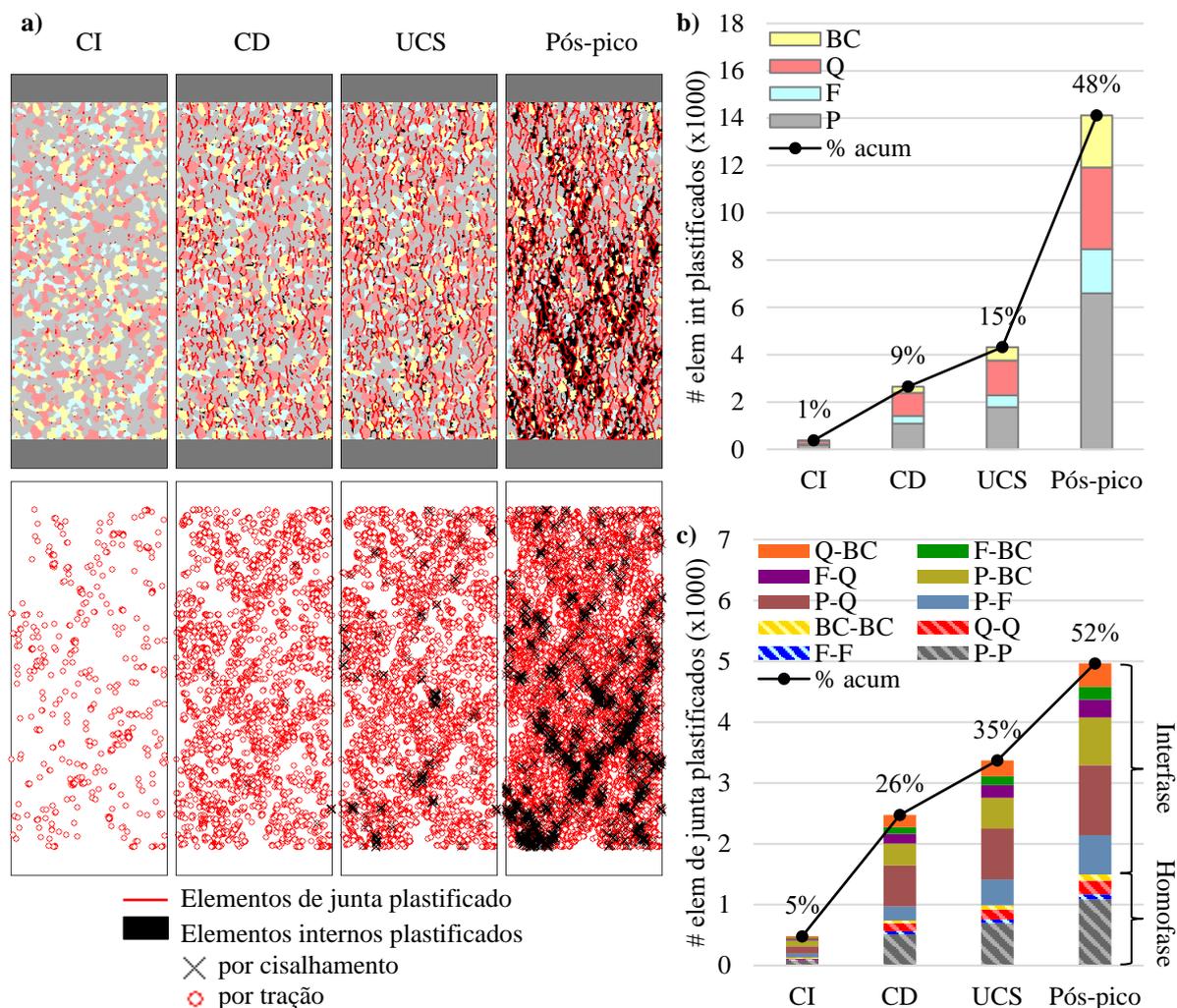


Figura 4.16. a) Processo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 1 mostrando os estágios CI, CD, UCS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.

Enquanto o nível de carregamento aumenta, as juntas danificadas começam a se interconectar através dos blocos plastificados por tensões de tração, sendo o tipo de ruptura dominante até o estágio de tensão máxima suportada. O início do dano por cisalhamento acontece nas tensões próximas ao ponto CD, de forma que os elementos afetados atuam como pontes entre fraturas uma vez atingida a tensão de pico.

Por fim, na etapa pós-pico, o número de elementos internos plastificados aumenta rapidamente, passando de 15 a 48% e de 19 a 57% para a Calibrações 1 e 2, respectivamente. Pelo contrário, a ruptura dos elementos de junta parece manter uma taxa relativamente constante durante as diferentes etapas analisadas, evidenciando uma maior quantidade de juntas de Interfase

rompidas com respeito às juntas de Homofase danificadas (numa relação 70/30 aproximadamente). Em grande parte, este resultado pode ser justificado pela maior presença de elementos de junta de Interfase nos corpos de prova simulados.

O comportamento descrito previamente coincide com os resultados apresentados por Lisjak *et al.* (2013), Park *et al.* (2017), Abdelaziz *et al.* (2018) e Wan & Li (2022). De igual forma, o tipo de ruptura conseguido é semelhante aos fraturamentos acontecidos nos modelos CVBM calibrados por outros autores (p. ex. Y. Li & Bahrani (2021a), Hamediazad & Bahrani (2022) e Sanipour *et al.* (2022)).

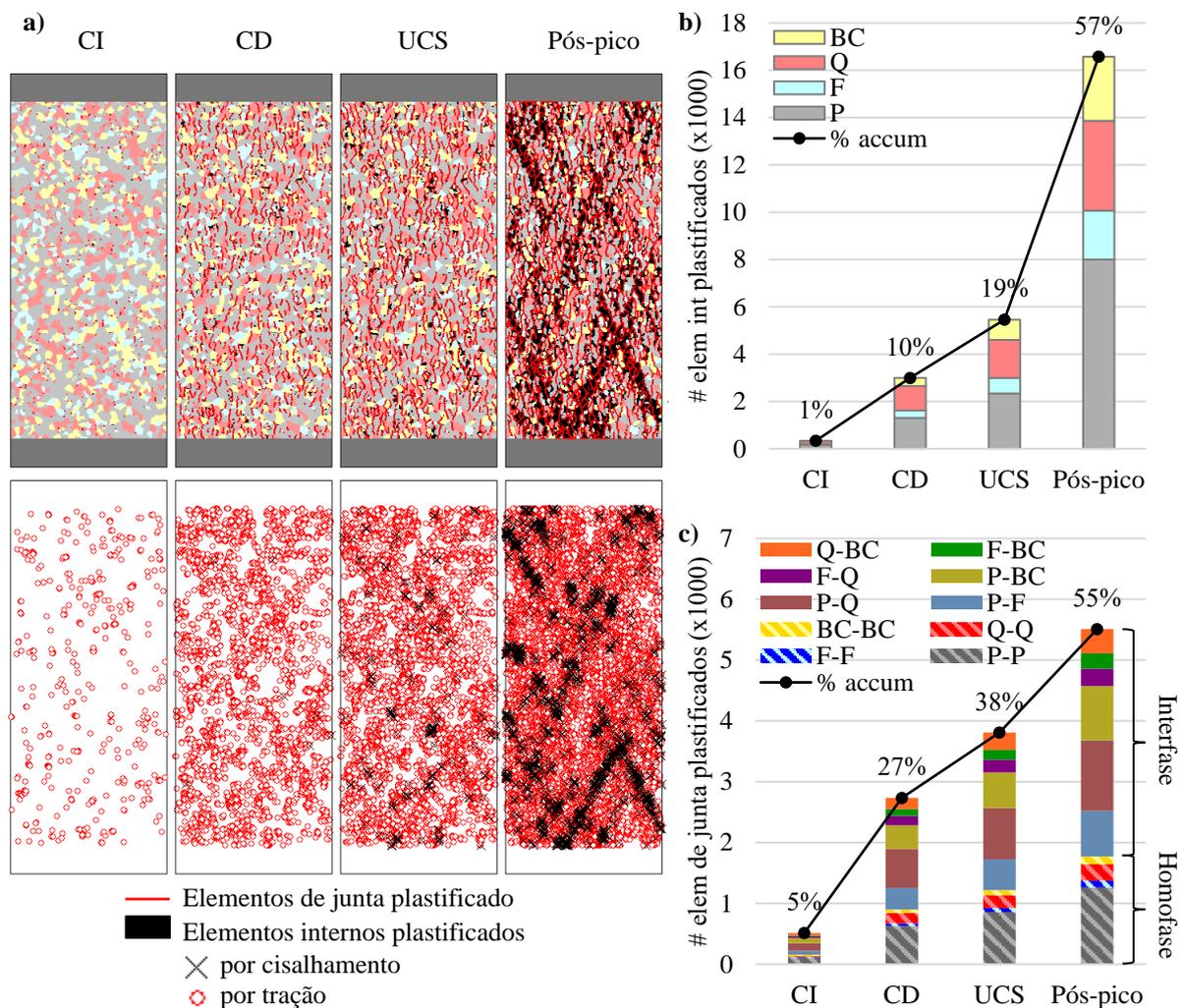


Figura 4.17. a) Processo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 2 mostrando os estágios CI, CD, UCS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.

A Figura 4.18 exibe o padrão de fraturamento dos modelos de tração indireta para ambas as tentativas de calibração. Os corpos de prova se mostram indeformados procurando localizar os tipos de junta rompidos. O cômputo de elementos plastificados indica que o fraturamento do material é governado pela ruptura por tração dos blocos Voronoi, acontecendo dano por cisalhamento nas regiões contíguas aos contatos com as placas de carregamento.

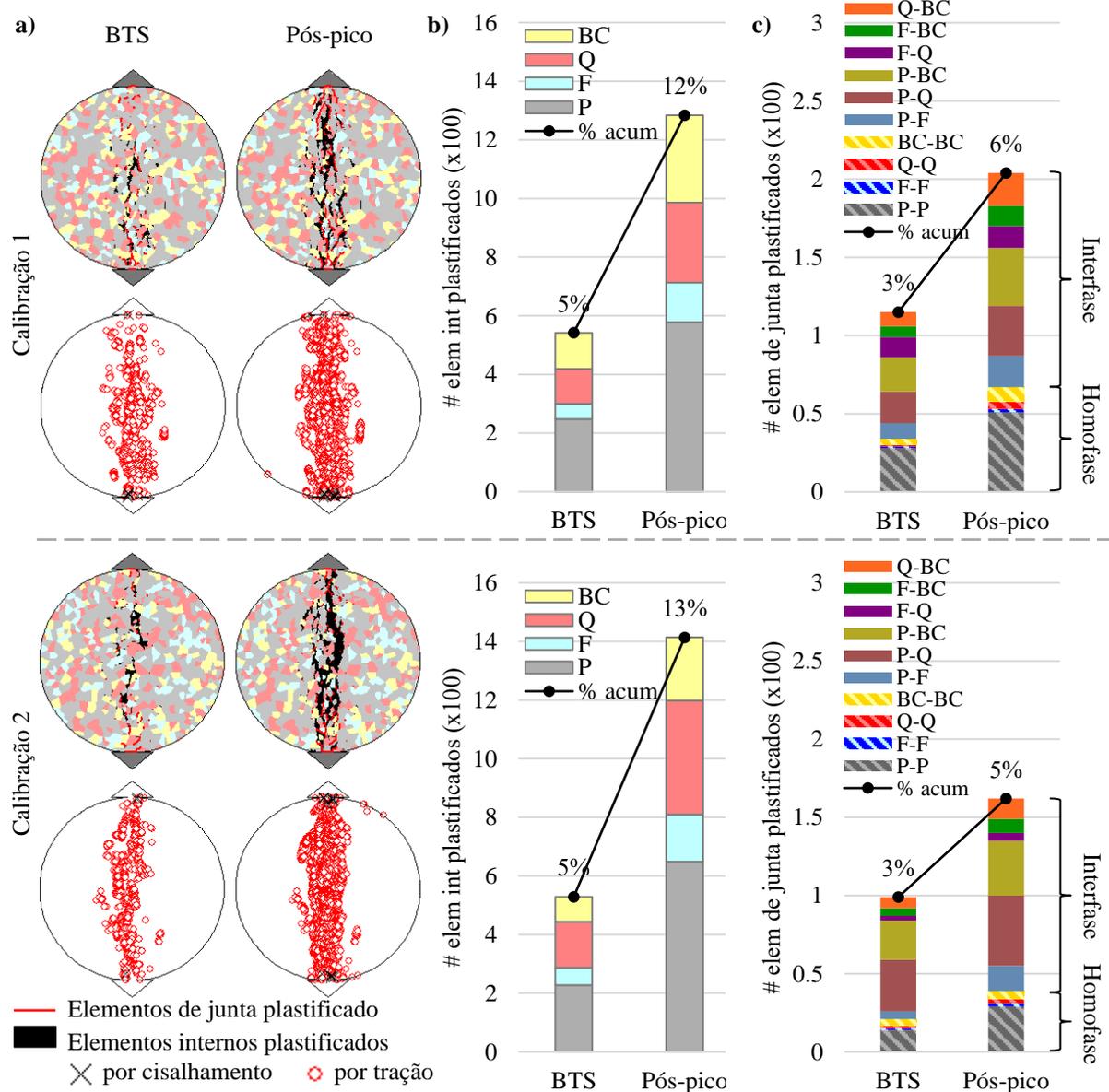


Figura 4.18. a) Processo de fraturamento do modelo BTS para a Calibração 1 e 2 mostrando os estágios BTS e Pós-pico. b) Cômputo de elementos internos e c) elementos de junta plastificados com as porcentagens de ruptura correspondentes.

O tipo de ruptura desenvolvido pode ser classificado como “múltiplo central” de acordo com as observações realizadas por Basu *et al.* (2013), sendo característico de rochas que conseguem armazenar uma grande quantidade de energia de deformação. Contrariamente ao modelo UCS, a porcentagem de elementos internos plastificados ultrapassa o valor associado aos elementos de junta rompidos, predominando o desenvolvimento de fraturas intragranulares e transgranulares. O resultado é congruente com a dependência encontrada entre a tensão BTS e os parâmetros de resistência definidos para os blocos. Do mesmo modo, a relação entre juntas de Interfase e de Homofase danificadas manteve uma proporção similar daquela conseguida nos modelos de compressão simples, atingindo um valor em torno de 75/25 nos estágios examinados.

4.4.3. Análises complementários

Nesta seção foram realizadas várias análises complementárias que tentam esclarecer algumas das questões que sucederam no decorrer do processo de calibração. O primeiro ponto a ser examinado está relacionado com a hipótese adotada na definição dos valores de rigidez normal para as juntas de Interfase. Na Seção 3.4, foram mencionados mais dois métodos de cálculo para os parâmetros k_n^{ij} , além da média ponderada empregada neste trabalho. Visando elucidar a importância do procedimento escolhido, foi simulado o ensaio UCS aproveitando o modelo gerado para a Calibração 1, mantendo a relação $k_n / k_s = 0,1$ e mudando os valores de rigidez normal conforme a média aritmética e o menor valor entre k_n^i e k_n^j . Os parâmetros obtidos para cada um dos métodos mostram-se na Tabela 4.9. Os resultados revelam que empregando a média aritmética, a maioria das juntas de Interfase apresentam parâmetros de deformabilidade inferiores aos conseguidos quando aplicada a média ponderada, obtendo os valores mínimos para o caso em que o método do menor valor foi considerado.

Na Figura 4.19 são comparadas as curvas de tensão-deformação e o tipo de fraturamento para os três procedimentos analisados. Nota-se uma redução na resistência do corpo de prova para as duas opções complementárias, concordando com o decremento geral das rigidezes das juntas de Interfase. Porém, as tensões características e as trajetórias das fraturas não sofreram mudanças significativas, indicando que os valores de k_n^{ij} afetam o comportamento do modelo no trecho de crescimento instável das fraturas. Uma maior rigidez das juntas de Interfase pode estar dificultando a propagação das fraturas intergranulares, especialmente por aquelas juntas que apresentam uma inclinação mais pronunciada com relação à direção de carregamento.

A Tabela 4.10 resume os parâmetros macroscópicos conseguidos nas três simulações, evidenciando também uma menor elasticidade global para os modelos alternativos. Entretanto, independente do procedimento utilizado, o erro com relação aos resultados experimentais não ultrapassa o 6% em todos os casos.

Tabela 4.9. Rigidez normal das juntas considerando diferentes métodos de cálculo.

Junta	k_n (MPa/m)		
	Média Ponderada (Cal 1)	Média Aritmética	Menor
P-P ^a	2,96E+08	=	=
P-F	2,85E+08	2,69E+08	2,42E+08
P-Q	3,01E+08	3,05E+08	2,96E+08
P-BC	2,52E+08	2,06E+08	1,15E+08
F-F ^a	2,42E+08	=	=
F-Q	2,87E+08	2,78E+08	2,42E+08
F-BC	1,72E+08	1,79E+08	1,15E+08
Q-Q ^a	3,13E+08	=	=
Q-BC	2,30E+08	2,14E+08	1,15E+08
BC-BC ^a	1,15E+08	=	=

P – Plagioclásio, F – K-Feldspato, Q – Quartzo, BC – Biotita/Clorita

^aJunta de Homofase

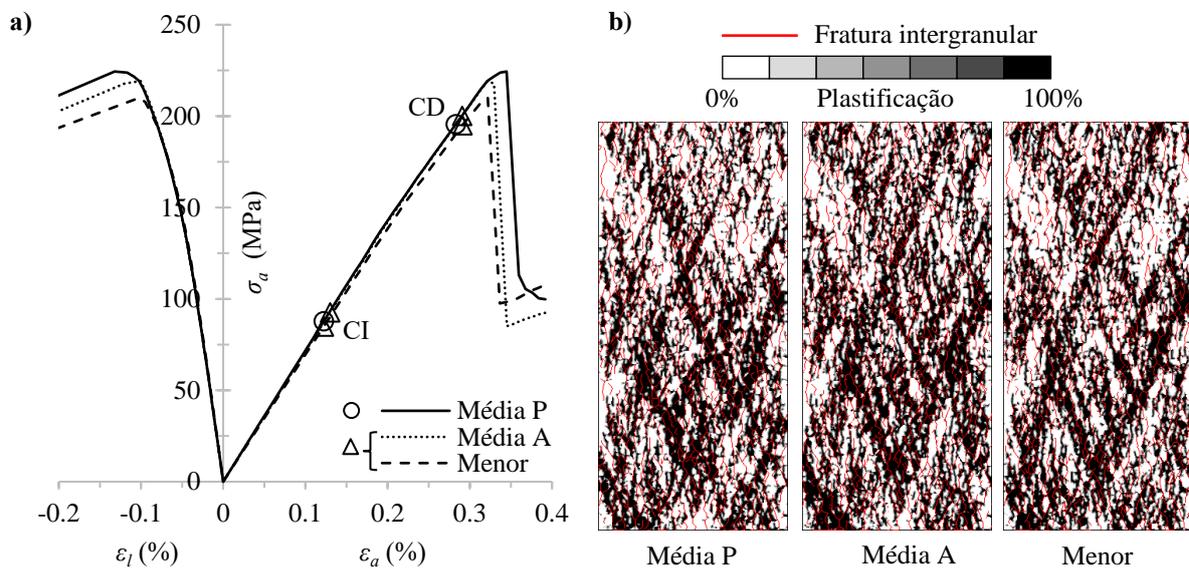


Figura 4.19. Influência do método de cálculo de k_n^{ij} na a) curva tensão-deformação e no b) tipo de fraturamento do modelo UCS para a Calibração 1.

Tabela 4.10. Efeito do método de cálculo de k_n^{ij} nos parâmetros macroscópicos do modelo.

Propriedade	Lab	Média P	Erro (%)	Média A	Erro (%)	Menor	Erro (%)
<i>Elasticidade</i>							
E_0 (GPa)	73,6	71,9	-2,33	71,5	-2,85	69,6	-5,43
ν_0	0,22	0,227	2,98	0,226	2,86	0,213	-3,04
<i>Tensões características e de pico</i>							
CI (MPa)	89,2	87,8	-1,62	92,7	3,92	84,9	-4,82
CD (MPa)	189,2	195,6	3,37	200,2	5,81	195,1	3,12
UCS (MPa)	222,1	224,4	1,05	219,2	-1,31	210,0	-5,45

A Figura 4.20 apresenta a quantificação de elementos plastificados durante o processo de carregamento, revelando variações pouco significativas tanto na quantidade total de elementos rompidos quanto nos valores particulares para cada tipo de bloco e junta. Em conclusão, o método empregado na definição do comportamento elástico das juntas de Interfase exerce pouca influência na resposta geral do modelo, podendo ser adotada qualquer uma das hipóteses para a calibração do CVBM heterogêneo.

O seguinte assunto a ser analisado encontra-se na possibilidade de ocorrência do problema de mal condicionamento nas simulações executadas. Esse problema surge dos erros de precisão acontecidos durante a modelagem numérica como resultado de amplas diferenças na ordem de magnitude entre alguns dos parâmetros adotados.

Neste caso, as propriedades de deformabilidade, assumidas para os elementos de interação entre as placas de carregamento e o corpo de prova, apresentam valores afastados daqueles utilizados na definição dos outros tipos de juntas. Deste modo, verificou-se a confiabilidade dos resultados para os modelos ajustados na Calibração 1 (PC-1), executando os mesmos arquivos de entrada num computador diferente (PC-2) com as seguintes especificações: *desktop* com processador Intel® Core™ i7-4790 a 3,60GHz e 32GB de RAM. As Figuras 4.21 e 4.22 resumem os comportamentos conseguidos para ambas as versões dos ensaios simulados.

Para o modelo UCS, as curvas de tensão-deformação não apresentaram maiores diferenças até a tensão máxima atingida, porém, foram detectadas variações nos valores de CI e CD produto da resolução na aquisição dos dados entre os distintos estágios de análise. Observando o processo de fraturamento desenvolvido nos dois casos, apenas foram notadas alterações nos elementos plastificados logo de alcançada a tensão de dano por fraturas. Mesmo assim, o modo de falha acontecido foi mantido apesar da mudança no *hardware* utilizado.

De igual forma, o modelo de tração indireta apresentou uma resposta similar até a tensão de pico para ambas as simulações, mostrando poucas diferenças nas trajetórias de fraturamento

uma vez atingida a condição residual. Em conclusão, os resultados sugerem que os valores adotados para as juntas de contato não influenciam no comportamento macroscópico pré-pico dos modelos e que as variabilidades nas trajetórias das fraturas não geram mudanças significativas no tipo de falha conseguido.

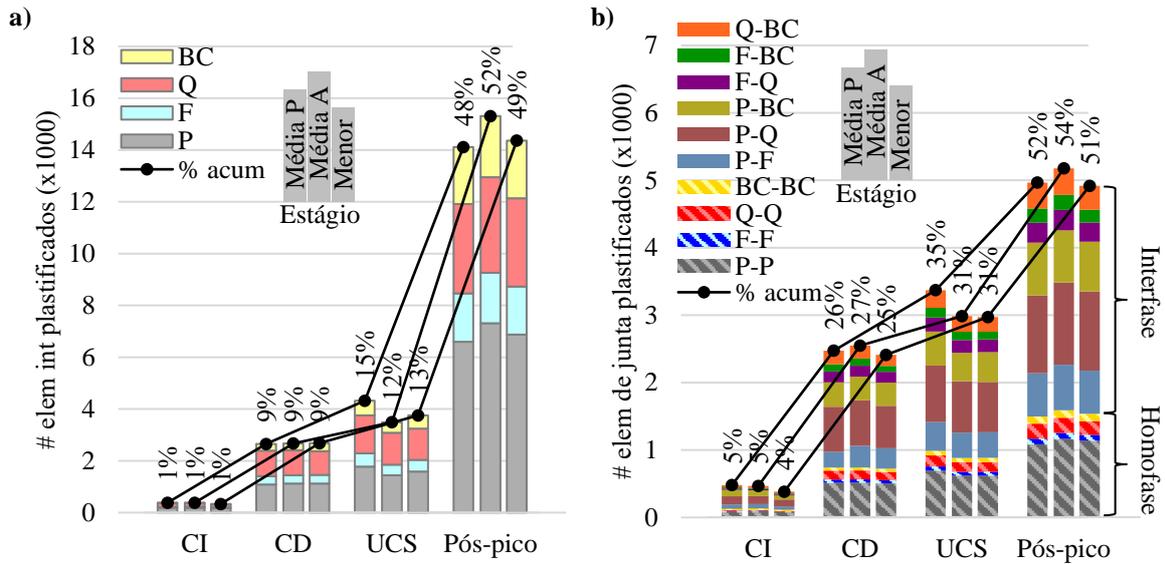


Figura 4.20. Influência do método de cálculo de k_n^{ij} na quantidade de a) elementos internos e b) elementos de junta plastificados para o modelo de compressão simples.

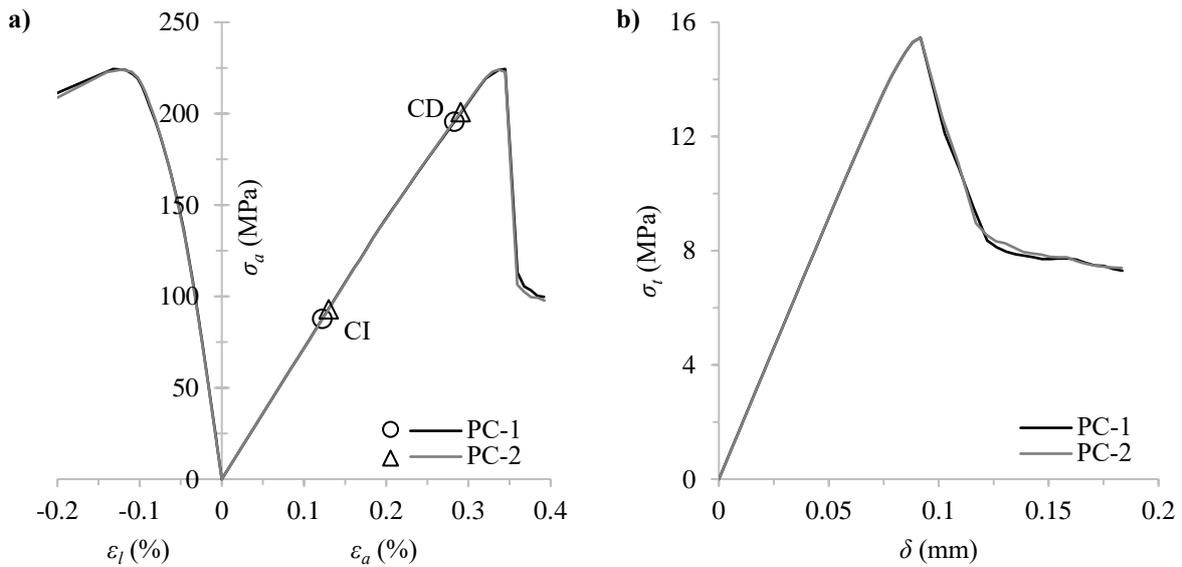


Figura 4.21. Análise do problema de mal condicionamento para os modelos da Calibração 1. a) Modelo de compressão simples e b) modelo de tração indireta.

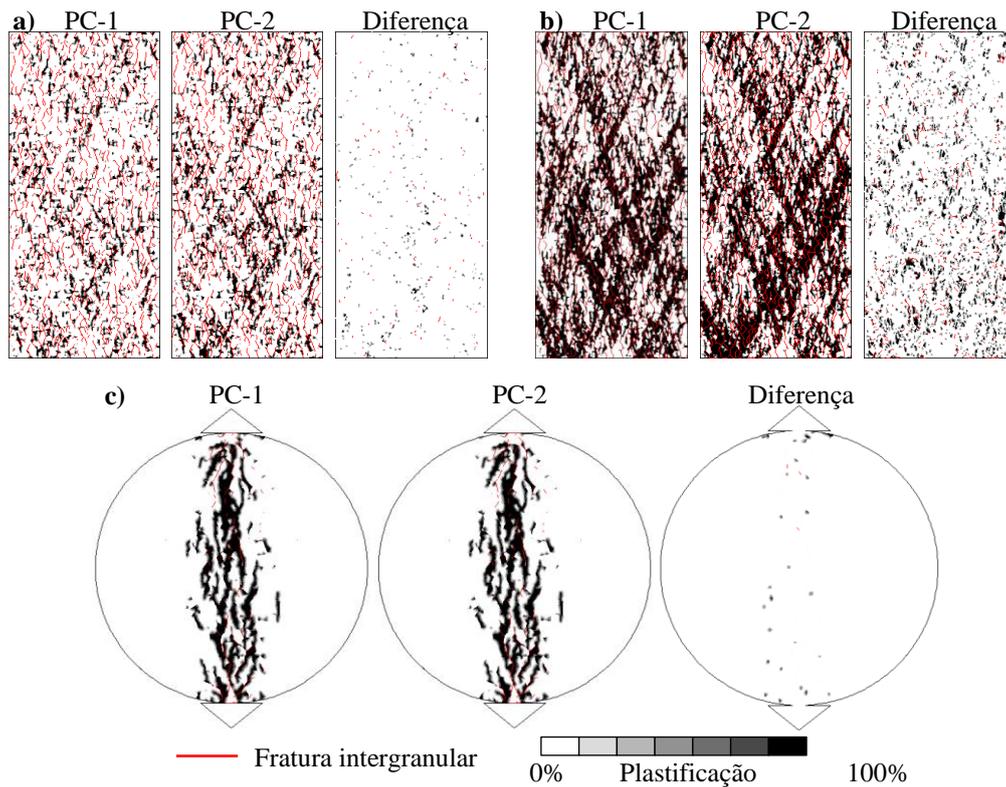


Figura 4.22. Plastificação das amostras na análise do problema de mal condicionamento. Estágios a) UCS e b) Pós-pico para o modelo UCS. c) Estágio Pós-pico para o modelo BTS.

4.5. CONCLUSÕES PARCIAIS

Neste capítulo foi demonstrada a capacidade do CVBM heterogêneo para simular o comportamento macroscópico das rochas na escala de laboratório, ajustando satisfatoriamente a resposta do Diorito Äspö para as condições de compressão simples e tração indireta. Para ambos os estados de carregamento foi possível acompanhar o desenvolvimento dos diferentes tipos de fraturas, resultando num processo de ruptura congruente com as observações experimentais realizadas para as rochas tipo II. O modelo conseguiu-se adaptar para a simulação de ensaios feitos em amostras particulares, atingindo o critério de aceitabilidade imposto sobre as propriedades macroscópicas emergentes.

Durante o processo de calibração estabelecido foi avaliado o efeito de vários dos parâmetros do modelo sobre a resposta macroscópica simulada, permitindo determinar aqueles fatores que governam a deformabilidade do material e aqueles que geram uma mudança global do comportamento. As análises realizadas nesta seção também podem ser aplicadas aos modelos que empregam o CVBM convencional, visto que os resultados apresentados são coerente com

as observações feitas por Rógenes (2021), servindo de complemento ao longo do procedimento de ajuste.

A relação $k_n / k_s = 0,1$ é um dos parâmetros mais relevantes que apresentou discordância com relação à faixa de valores esperados ficando embaixo do valor mínimo recomendado de um. Vários fatores podem ter influenciado na obtenção desta propriedade particular, destacando a discrepância entre as distribuições de tamanhos do modelo numérico e da rocha real, a pouca flexibilidade na definição dos parâmetros de deformabilidade dos blocos, o tipo de rocha analisada e a condição de carregamento em deformação plana do modelo.

Embora seja possível reproduzir o tamanho médio dos minerais da rocha, o algoritmo de geração da rede de juntas Voronoi implementado no RS2 mostrou-se limitado na representação da forma da distribuição granulométrica destes elementos, mesmo empregando a configuração irregular. Uma representação mais fidedigna das características geométricas dos minerais pode ser conseguida a partir de algoritmos que modifiquem a configuração inicial dos blocos, adaptando-os a uma forma e distribuição granulométrica determinada, como foi proposto por Mollon & Zhao (2012). De forma alternativa, podem ser utilizados outros tipos de blocos que permitam definir previamente algumas qualidades geométricas específicas, como o tamanho, forma e orientação das partículas. Tal é o caso dos blocos de Laguerre, os quais tem sido usados recentemente na modelagem de materiais metálicos e de rochas (Recarey Morfa *et al.*, 2018; Pérez *et al.*, 2019).

Por outro lado, a condição bidimensional em deformação plana do modelo implica algumas diferenças com relação aos ensaios experimentais, tanto no tipo de carregamento aplicado quanto na estrutura interna considerada. No primeiro caso, a tensão perpendicular ao plano do modelo pode gerar uma redução da zona de endurecimento pré-pico, afetando o processo de fraturamento e as tensões características calculadas. No segundo caso, a estrutura dos grãos representados na condição bidimensional é similar a um conjunto de vigas empilhadas, afastando-se do arranjo real visto em laboratório e que poderia ser retratado com maior precisão empregando uma versão tridimensional do modelo, definindo os blocos como poliedros de tipo Voronoi.

Cabe ressaltar que o CVBM heterogêneo pode ser calibrado a partir de diversas combinações de parâmetros, como indicado por Hamediazad & Bahrani (2022) para a versão convencional. Isto obedece à grande quantidade de variáveis em comparação com as propriedades macroscópicas

que tentam ser ajustadas. Desta forma, e como sugerido por Sinha & Walton (2020a), deve ser considerado o maior número possível de características da rocha durante o procedimento de calibração, a fim de reduzir a quantidade de soluções admissíveis e permitir uma aproximação mais adequada do comportamento do material simulado.

As análises do processo de fraturamento mostraram que, na condição de compressão não confinada, prevaleceram a criação e propagação de fraturas intergranulares ao longo das etapas prévias à tensão de pico, incentivando também a plastificação por tração dos elementos internos nos arredores das pontas das fraturas. Entretanto, no modelo de tração indireta, a ruptura do material aconteceu principalmente pela plastificação dos blocos Voronoi, de forma que as suas propriedades de resistência governaram a resposta macroscópica do material.

Por último, foi avaliada a influência do método empregado na definição das rigidezes normais para as juntas de Interface, concluindo que qualquer uma das hipóteses examinadas pode ser utilizada na calibração do CVBM heterogêneo.

5. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS TAMANHOS DOS ELEMENTOS

Como foi demonstrado no trabalho desenvolvido por Rógenes *et al.* (2022), a resposta do CVBM convencional está fortemente influenciada pela distribuição de tamanhos dos blocos e a dimensão média dos elementos internos. Na mesma linha de ideia, Y. Li & Bahrani (2021a) e Sanipour *et al.* (2022) sugerem a adoção de um tamanho de blocos adequado que garanta a quantidade mínima de 10 unidades ao longo da menor dimensão, a fim de reduzir a sua influência na resposta global resultante. Estes mesmos autores mencionam que o número médio de elementos internos deve estar entre 12 e 25, de forma que seja fornecida a suficiente quantidade de graus de liberdade para capturar o correto desenvolvimento das fraturas intragranulares e transgranulares.

Em consequência, neste capítulo são estudados os efeitos do tamanho dos diferentes elementos que compõem o CVBM heterogêneo sobre os parâmetros macroscópicos usados como referência durante o procedimento de ajuste. Os resultados são apresentados em função de quantidades conhecidas empregadas na definição do modelo, sendo normalizadas com relação a características geométricas específicas do corpo de prova simulado. Adicionalmente, foi explorada a idoneidade da Equação 3.4 para a determinação dos valores de rigidez normal das juntas de Homofase, ressaltando que esta relação é utilizada comumente na caracterização das interações entre elementos que conformam os modelos tipo FDEM.

5.1. EFEITO DO TAMANHO DOS BLOCOS VORONOI

Em primeiro lugar, foi avaliada a dependência dos resultados com relação ao tamanho médio dos blocos Voronoi, o qual está relacionado diretamente com o comprimento médio das juntas \bar{l}_j . O valor de \bar{l}_j empregado na definição dos modelos das Calibrações 1 e 2 foi considerado como o comprimento de referência \bar{l}_j^{ref} , com um valor de 1,05mm.

A Figura 5.1 mostra a modo de exemplo, os corpos de prova do ensaio BTS gerados a partir de diferentes relações $\bar{l}_j / \bar{l}_j^{ref}$, sendo a figura b, o corpo de prova empregado durante a Calibração 1. Adicionalmente, foi garantida uma quantidade mínima de 10 elementos ao longo da menor dimensão das amostras, conforme o D_{50} calculado para cada configuração examinada.

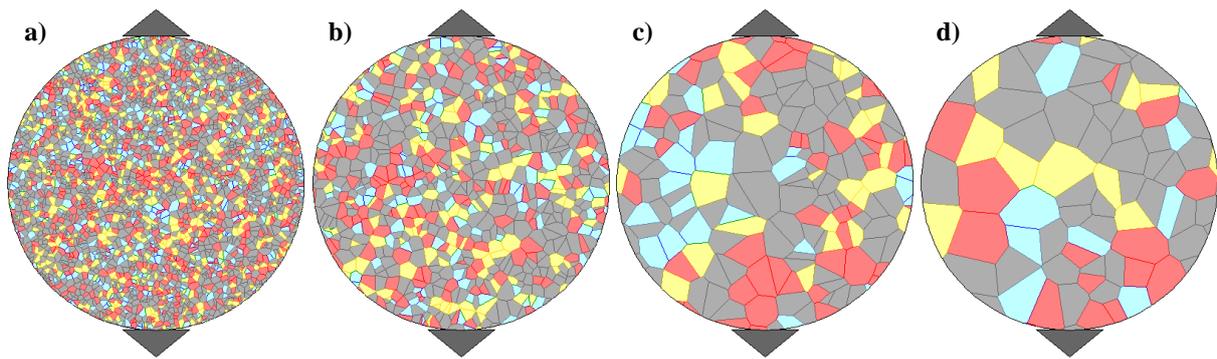


Figura 5.1. Modelos do ensaio BTS para diferentes valores de $\bar{l}_j/\bar{l}_j^{ref}$: a) 0,5, b) 1, c) 2 e d) 3.

De forma preliminar, foi realizada a análise das relações entre o número de blocos e a quantidade de juntas obtidas para cada uma das amostras, evidenciando uma variação pouco significativa à medida que aumenta o comprimento médio das juntas, passando de 0,35 a 0,39. Estes resultados indicam que para os tamanhos de blocos considerados, os diferentes tipos de elementos que conformam o modelo possuem uma participação semelhante sobre a resposta macroscópica resultante.

Apesar de que a configuração interna dos materiais muda para todos os corpos de prova (Figura 5.1), o foco principal deste estudo está na avaliação da capacidade da Equação 3.4 para mitigar o efeito do tamanho dos blocos na resposta geral conseguida. Sendo assim, foram executadas duas simulações para cada uma das amostras, numa delas foram mantidos os valores de rigidez resultantes da Calibração 1, e na outra foram modificadas as rigidezes conforme o D_{50} correspondente.

A Figura 5.2 resume os resultados do comportamento macroscópico para ambas as versões avaliadas. Nota-se que para as variantes onde foram mantidos os parâmetros calibrados, as propriedades elásticas tendem a aumentar com o acréscimo do tamanho médio dos blocos. Da mesma forma, as tensões características e de pico mostram uma disposição similar à medida que cresce a relação $\bar{l}_j/\bar{l}_j^{ref}$. Um comportamento similar foi reportado por Rógenes *et al.* (2022) para o CVBM convencional.

Uma vez que a correção do tamanho dos elementos foi aplicada, todos os parâmetros macroscópicos avaliados conseguiram uma maior estabilidade para a faixa de valores analisada, indicando que a relação adotada para definir os valores de k_n^i permite melhorar o desempenho do modelo na representação da resposta global da rocha. No entanto, o tipo de falha acontecido

sofre mudanças significativas com relação ao fraturamento conseguido para os corpos de prova calibrados, causado possivelmente pela variação na disposição interna dos minerais e pelo acréscimo ou diminuição na quantidade de graus de liberdade disponíveis, como pode ser observado na Figura 5.3.

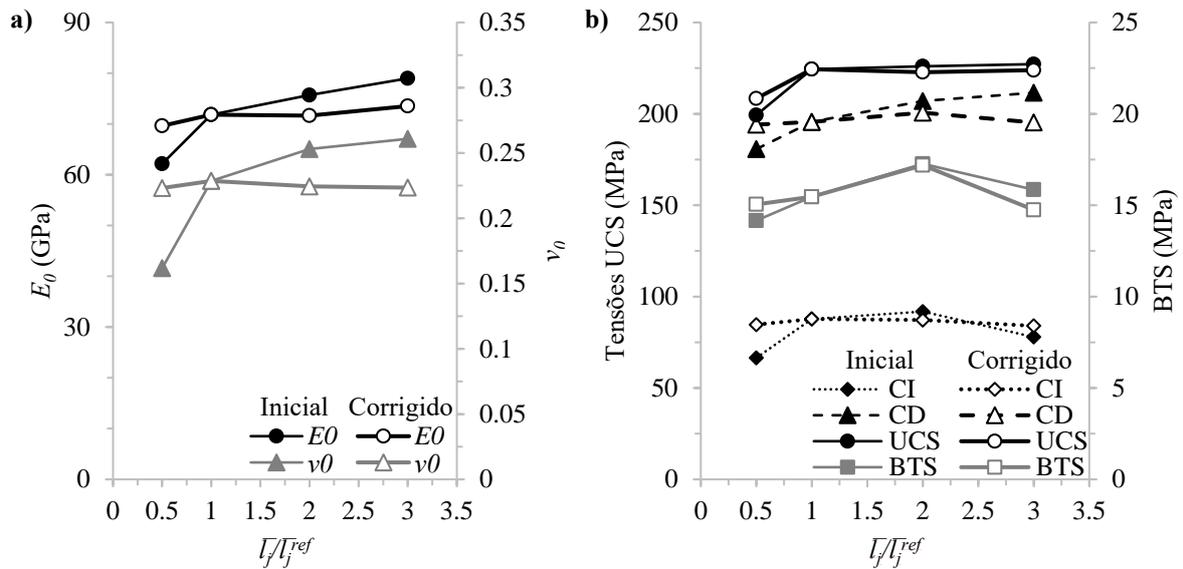


Figura 5.2. Efeito do tamanho dos blocos na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.

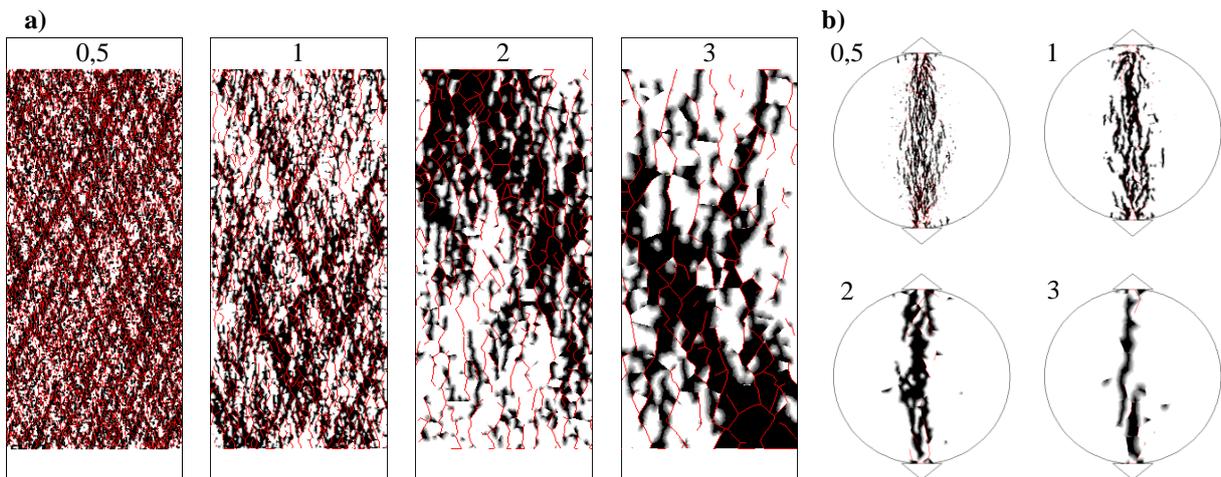


Figura 5.3. Corpos de prova na condição pós-pico considerando diferentes valores de $\bar{L}_j/\bar{L}_j^{ref}$. a) Modelos UCS, b) modelos BTS.

5.2. EFEITO DO TAMANHO DO CORPO DE PROVA

A seguir, foi verificada a dependência do modelo com relação às dimensões do corpo de prova. Este caso é complementar ao avaliado na seção anterior, devido a que a análise também está enfatizada na influência do tamanho dos blocos sobre o comportamento resultante, no entanto por meio de uma perspectiva diferente. Neste cenário, as dimensões dos corpos de prova empregados na Calibração 1 foram alteradas aplicando um fator de redução, isto provoca o aumento do tamanho dos blocos com relação à geometria da amostra.

Para esta condição, foi mantida a estrutura e disposição dos minerais, extraíndo sempre a porção central do corpo de prova de acordo com o coeficiente adotado (Figura 5.4-a). Os resultados das simulações para um fator igual a 0,25, 0,5, 0,75 e 1, são sintetizados na Figura 5.4, representados em função da relação entre o diâmetro da amostra (D_{CP}) e o diâmetro de partícula D_{50} . Esta relação permite visualizar o número médio de blocos Voronoi presentes ao longo da menor dimensão do modelo. Nota-se apenas uma leve perturbação nos valores das tensões características e de pico, mantendo uma resposta semelhante à obtida nos modelos corrigidos da Figura 5.2. Resultados similares foram reportados por Lan *et al.* (2010), onde unicamente o comportamento pós-pico sofreu alterações significativas.

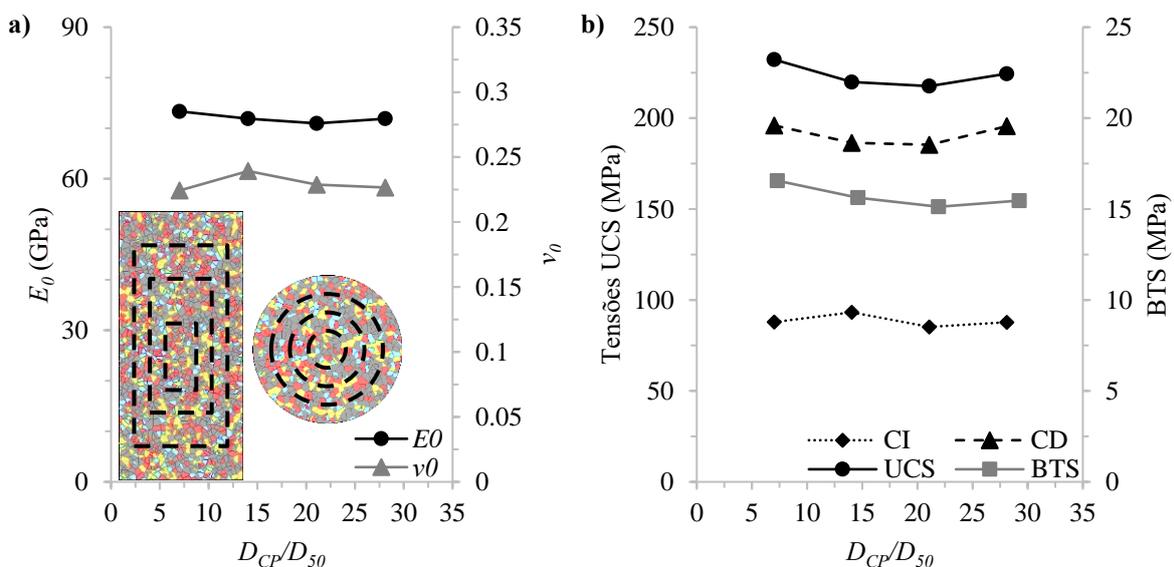


Figura 5.4. Efeito do tamanho da amostra na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.

Adicionalmente, foi estudada a mudança do conteúdo mineralógico à medida que o tamanho da amostra diminuía (Figura 5.5-a), evidenciando-se maiores perturbações nas porcentagens obtidas para os corpos de prova menores. Contudo, foi percebido que a maioria das variações apresentaram flutuações menores ao 5% ao redor dos valores estabelecidos inicialmente, podendo causar as leves alterações observadas nas propriedades macroscópicas analisadas. Finalmente, cabe ressaltar que os tipos de falha conseguidos nos modelos menores conservaram o padrão de fraturamento acontecido na mesma região do corpo de prova original (Figura 5.5-b).

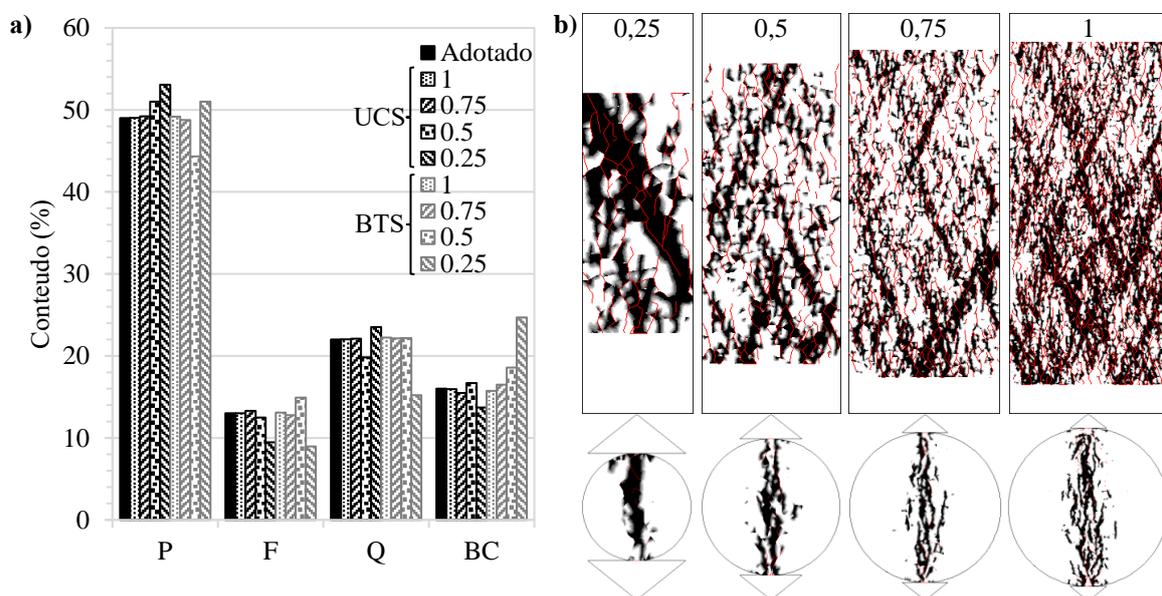


Figura 5.5. a) Alterações do conteúdo mineralógico dos modelos com a mudança no tamanho da amostra (P – Plagioclásio, F – K-Feldspato, Q – Quartzo, BC – Biotita/Clorita). b) Corpos de prova na condição pós-pico para diferentes valores do fator de escala.

5.3. EFEITO DO TAMANHO DOS ELEMENTOS INTERNOS

Por último, foi avaliada a dependência do modelo com relação ao tamanho da malha de elemento finitos, alterando o comprimento médio dos elementos internos (\bar{l}_m). Uma redução no valor de \bar{l}_m gera um aumento da relação \bar{l}_j / \bar{l}_m e vice-versa, sendo esta última a quantidade adotada como propriedade de controle para as análises dos resultados. Evidentemente, quanto menor seja o tamanho dos elementos, maior número de graus de liberdade estarão disponíveis para a representação do fraturamento dos blocos.

Neste caso, foram utilizados os mesmos corpos de prova gerados para a Calibração 1, avaliando diferentes relações de \bar{l}_j/\bar{l}_m na faixa de 0,5 até 4, obtendo um número médio de elementos internos por bloco entre 4 e 187. Como referência, a relação $\bar{l}_j/\bar{l}_m=1,3$ corresponde à configuração utilizada para os corpos de prova das calibrações, resultando numa quantidade de 14 elementos por bloco e ficando dentro da faixa recomendada citada no início deste capítulo.

A Figura 5.6 mostra o efeito da densidade da malha nas propriedades macroscópicas estudadas. Com exceção do módulo de Young inicial, o qual permanece quase constante, os parâmetros apresentam uma redução enquanto o número de elementos internos aumenta. Este comportamento pode ser ocasionado pelo acréscimo da sensibilidade dos elementos internos às deformações experimentadas, fazendo com que consigam atingir a plastificação cada vez mais rápido e, conseqüentemente acelerando o início e desenvolvimento das fraturas.

Na Figura 5.7 são exibidas algumas das amostras no estágio posterior à tensão de pico, evidenciando um desenvolvimento mais detalhado das fraturas conforme aumenta a densidade da malha. Nota-se que para valores de \bar{l}_j/\bar{l}_m superiores ao empregado nos modelos calibrados, o modo de ruptura não apresenta mudanças significativas, embora a quantidade de elementos plastificados seja maior.

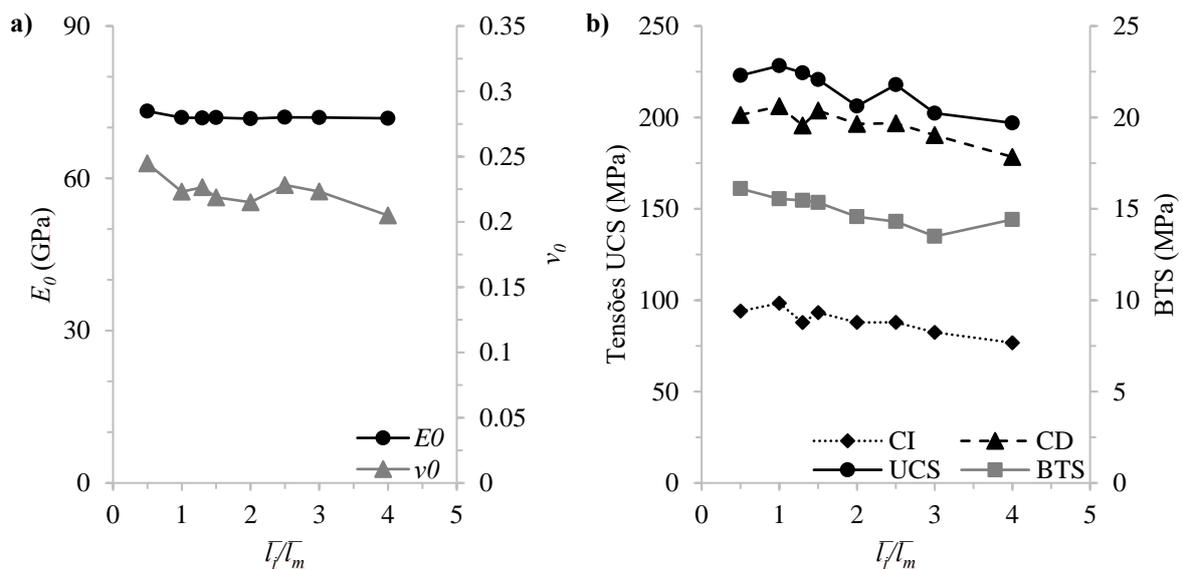


Figura 5.6. Influência da densidade da malha na a) elasticidade global e nas b) tensões macroscópicas dos modelos.

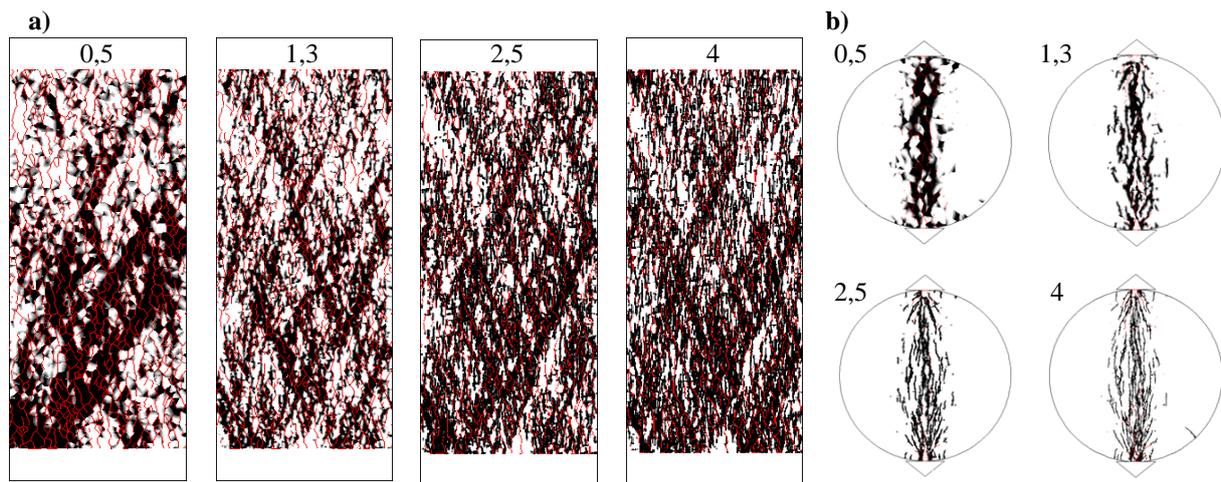


Figura 5.7. Corpos de prova na condição pós-pico para diferentes valores de \bar{l}_j/\bar{l}_m . a) Modelos UCS, b) modelos BTS.

5.4. CONCLUSÕES PARCIAIS

Neste apartado foram avaliadas várias abordagens na determinação da dependência do CVBM heterogêneo com relação ao tamanho dos elementos internos e dos próprios blocos Voronoi. Seguindo algumas das recomendações encontradas na literatura para o modelo convencional, foram analisados três cenários: a variação do tamanho dos blocos para a mesma geometria do corpo de prova, a mudança no tamanho da amostra para a mesma configuração interna e a alteração do tamanho dos elementos internos para os mesmos modelos dos ensaios simulados. Em todos os casos foi evidente a influência exercida por estas quantidades sobre a elasticidade, as tensões características e a resistência da rocha analisada, provocando a mudança no desenvolvimento dos diferentes tipos de fraturas.

Os resultados foram representados em função de relações entre grandezas utilizadas para a definição da geometria dos corpos de prova, pretendendo mitigar os efeitos que possam derivar de características particulares de cada modelo.

Destaca-se o bom desempenho da Equação 3.4 para minimizar o impacto do tamanho dos blocos sobre a resposta macroscópica emergente, permitindo ajustar as rigidezes das juntas nos casos em que o CVBM heterogêneo seja aplicado a problemas de maior escala, semelhante à como foi feito por Y. Li & Bahrani (2021b) para a versão convencional. Igualmente, os resultados apresentados neste capítulo servem de orientação para futuras pesquisas que implementem o CVBM na sua versão convencional ou heterogênea.

6. CVBM CONVENCIONAL VS CVBM HETEROGÊNIO

Com o aumento das capacidades de cálculo e a implementação dos métodos discretos, nas últimas décadas têm-se desenvolvido grande número de pesquisas numéricas focadas na determinação das contribuições de cada uma das fontes de heterogeneidade na resposta geral das rochas. Boa parte destes estudos estão baseados nos conceitos do BBM ou GBM, onde os elementos que representam os minerais podem ser considerados rígidos ou deformáveis, perfeitamente elásticos ou com algum critério de plastificação ou ruptura. A continuação, são apresentados alguns dos trabalhos que abordam esta questão e as suas conclusões mais relevantes:

- Lan *et al.* (2010) modelaram a resposta de dois tipos de rochas, granito e diorito, quando submetidas ao ensaio de compressão simples, considerando blocos elásticos e integrando a heterogeneidade geométrica, material e de contatos. No documento são apresentadas algumas análises da influência de cada fonte de heterogeneidade sobre o desenvolvimento das tensões internas, principalmente de tração, concluindo que o tamanho e a geometria dos blocos foram as características mais relevantes na definição da resistência da rocha, enquanto que a variabilidade dos minerais desempenhou um papel secundário.
- Valley *et al.* (2010) usaram o método dos elementos finitos para simular o comportamento das rochas nas condições de compressão simples e biaxial, empregando distribuições de probabilidade para integrar a heterogeneidade material nos elementos da malha. No trabalho foi avaliada a mudança da tensão máxima conseguida quando aplicados diferentes níveis de variabilidade dos parâmetros. Os resultados mostraram que só a existência de diferenças no módulo de elasticidade é suficiente para desenvolver tensões internas de tração, obtendo uma tensão de pico menor que a conseguida no modelo homogêneo equivalente.
- Bewick *et al.* (2012) empregaram o programa Phase 2 (atual RS2) para realizar uma análise mais detalhada do efeito da geometria dos blocos no desenvolvimento das tensões internas, adotando a divisão do espaço em polígonos Voronoi com diferentes níveis de irregularidade dos elementos. Adicionalmente, os autores avaliaram o impacto de assumir partículas rompíveis na simulação de um arenito com o *software* de elementos discretos PFC2D. Os modelos revelaram que as tensões de tração geradas ao interior do corpo de prova estão influenciadas principalmente pela orientação das juntas ou interfaces entre elementos e que

a resistência da rocha está dominada pelas propriedades mecânicas das partículas e não pela sua geometria.

- Sinha & Walton (2020a) avaliaram a influência da incorporação da heterogeneidade material e de contatos nos modelos de blocos colados submetidos aos estados de compressão biaxial e tração indireta. Nesta pesquisa, foram empregados diferentes tipos de abordagens para representar o comportamento do granito selecionado, considerando blocos elásticos ou inelásticos com ou sem a variação das propriedades internas. Os resultados mostraram que os modelos de blocos inelásticos heterogêneos conseguiram uma aproximação mais realista do processo de fraturamento na escala dos minerais, destacando a contribuição da variabilidade elástica no desenvolvimento de dano por tração.
- Yanbo Zhang *et al.* (2020) realizaram ensaios de tomografia computadorizada para várias amostras de um arenito com o objetivo de capturar a composição mineralógica e a textura da rocha, gerando os respectivos modelos numéricos tridimensionais que logo foram submetidos ao ensaio de compressão simples. Os autores ressaltaram as contribuições da heterogeneidade interna no desenvolvimento do modo de ruptura e no comportamento pós-pico do material.

Embora todas as pesquisas referenciadas destaquem a importância da inclusão de uma ou várias fontes de heterogeneidade na modelagem das rochas, ainda não existe um consenso sobre a contribuição de cada componente na resposta geral do material representado. Isso pode ser ocasionado pela variedade de métodos, modelos e hipóteses adotadas sobre a mecânica dos elementos que representam os minerais, pela complexidade do fenômeno estudado e pela dificuldade na obtenção de dados experimentais que permitam a verificação dos resultados numéricos.

A seguir é feita a análise particular para o CVBM convencional e heterogêneo, a fim de contribuir na discussão sobre a influência da inclusão da heterogeneidade material e de contatos no desempenho global do modelo.

6.1. CVBM CONVENCIONAL EQUIVALENTE

Inicialmente, avaliou-se o comportamento do CVBM convencional aplicado aos corpos de prova utilizados durante a Calibração 1. Neste caso, foi mantida a configuração dos polígonos

Voronoi, porém considerando apenas um tipo de material para os blocos e as juntas com as propriedades mostradas na Tabela 6.1. Destaca-se unicamente a mudança nos parâmetros de deformabilidade de ambos os tipos de elementos, conforme os valores de elasticidade macroscópica obtidos dos ensaios experimentais.

Na Figura 6.1 são comparados os resultados dos modelos heterogêneos e convencionais equivalentes para os estados de compressão simples e tração indireta. Nota-se o acréscimo das tensões características e máximas atingidas quando usada a versão convencional, acontecendo o retardo do início do fraturamento, a redução no comprimento da zona de crescimento instável das fraturas e a intensificação da fragilidade do material. Contudo, o comportamento elástico apresentado pelos dois tipos de modelos não mostrou mudanças significativas.

Tabela 6.1. Parâmetros usados no CVBM convencional equivalente.

Parâmetro		Valor	Parâmetro		Valor
Blocos Voronoi	E_v (GPa)	73,6	Juntas	k_n (MPa/m)	2,44E+08
	ν_v	0,22		k_n/k_s	0,1
	c_v (MPa)	93		c_j (MPa)	62
	ϕ_v (°)	49		ϕ_j (°)	49
	T_v (MPa)	29,8		T_j (MPa)	53,9
	c_{rv} (MPa)	0		c_{rj} (MPa)	0
	ϕ_{rv} (°)	39		ϕ_{rj} (°)	39
	T_{rv} (MPa)	0		T_{rj} (MPa)	0
	ψ_v (°)	0		α	6,5

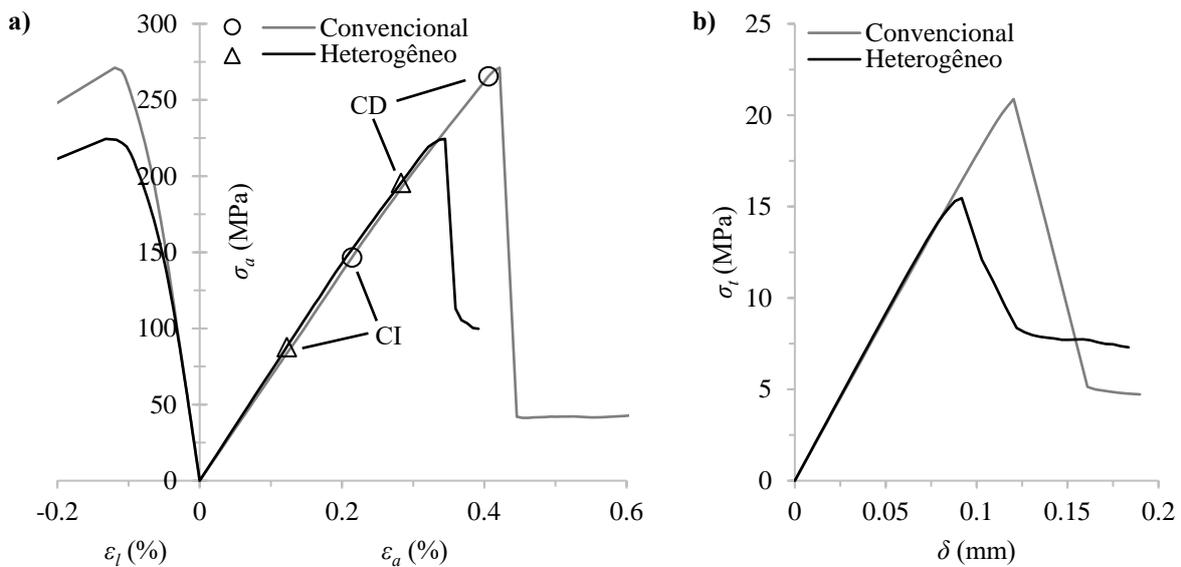


Figura 6.1. Resultados dos modelos de a) compressão simples e b) tração indireta empregando o CVBM heterogêneo (Calibração 1) e o CVBM convencional equivalente.

A Figura 6.2 exibe os processos de ruptura experimentados pelos corpos de prova para ambas as condições de carregamento estudadas. Observa-se que no modelo convencional aconteceu uma menor plastificação dos elementos internos e uma maior proliferação de fraturas intergranulares para os diferentes estágios apresentados. No caso do ensaio de tração indireta, o tipo de fraturamento mudou de “múltiplo central” a “central” de acordo com a classificação utilizada por Basu *et al.* (2013), sendo os elementos internos os membros ainda dominantes neste tipo de carregamento.

A análise da evolução da tensão principal menor durante o ensaio de compressão simples (Figura 6.3) mostra que a inclusão da heterogeneidade no modelo promove a geração de tensões de tração mais elevadas nas primeiras etapas do processo de carregamento, induzindo a criação de fraturas intergranulares e transgranulares que facilitam a posterior propagação na direção da tensão principal maior.

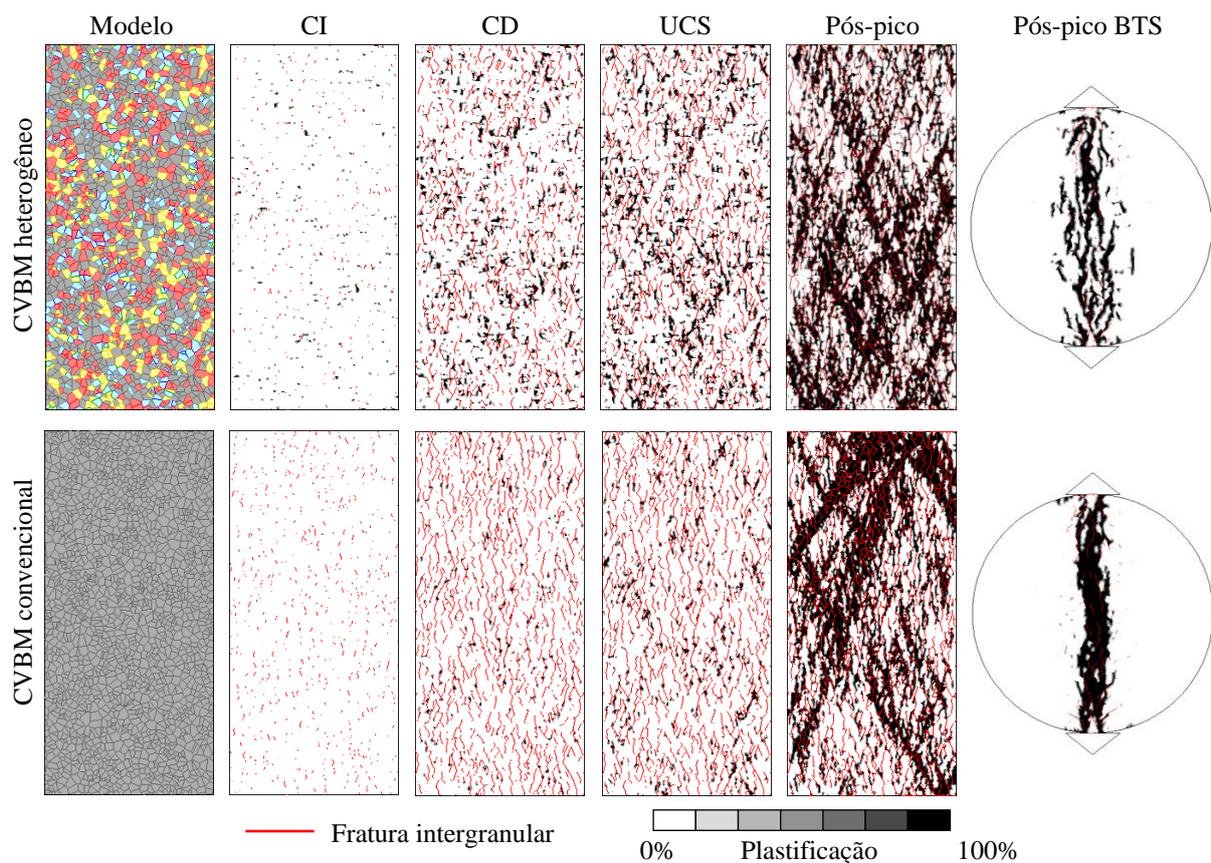


Figura 6.2. Processo de fraturamento acontecido nos modelos UCS e BTS para ambas as versões do CVBM analisadas.

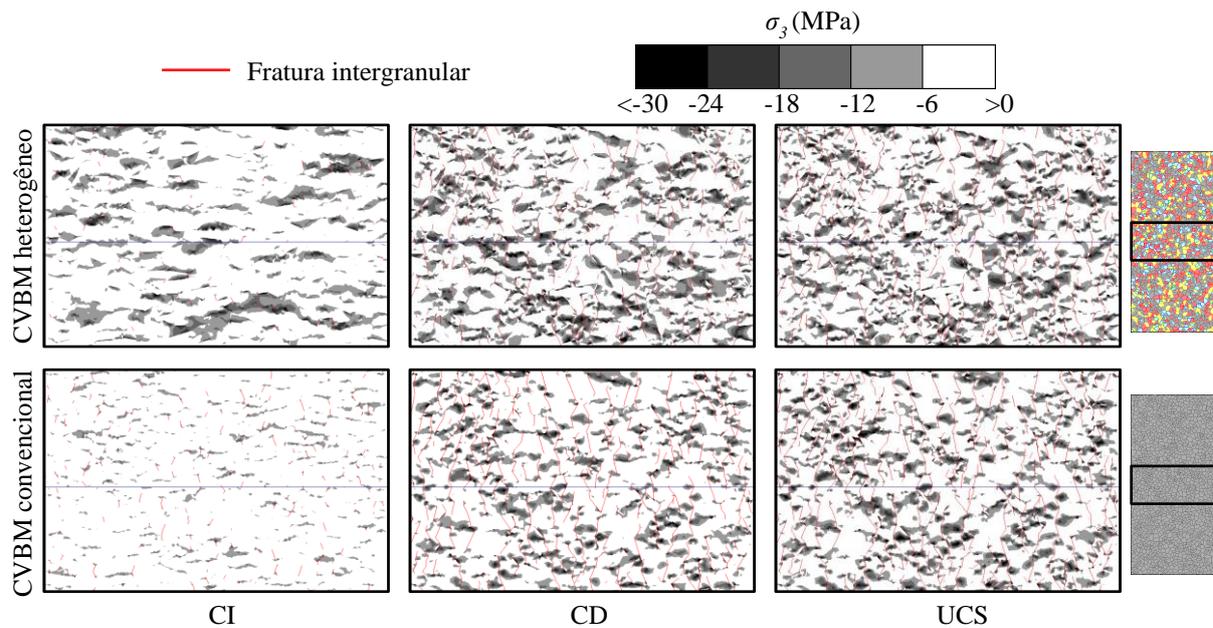


Figura 6.3. Comparativa das tensões de tração desenvolvidas na região central do corpo de prova para as duas variantes do CVBM.

Em contrapartida, no modelo convencional equivalente, a heterogeneidade induzida pela geometria dos blocos Voronoi parece ser insuficiente para provocar a plastificação dos elementos internos, de forma que exibem um comportamento similar ao mostrado por partículas de alta rigidez, acontecendo o fraturamento principalmente pelas juntas. Este mecanismo é o responsável do aumento nas tensões características e máximas, dado que várias das fraturas intergranulares não conseguem se propagar por conta da direção desfavorável das juntas vizinhas. Uma vez que a tensão aplicada provoca um deslocamento relativo entre blocos suficiente para produzir tensões de tração equivalentes à resistência do material nos extremos das fraturas existentes, os elementos internos plastificam rapidamente, acontecendo a falha súbita do corpo de prova.

A Figura 6.4 mostra o desvio das tensões verticais obtidas ao longo da altura média da amostra para os estágios onde foram identificadas as tensões características, constatando o efeito da heterogeneidade material e de contatos no desenvolvimento das tensões internas. Nota-se uma maior atividade do modelo heterogêneo para os estágios CI e CD quando comparado com o CVBM convencional, acontecendo picos de concentração de tensões ao redor dos minerais que apresentam as propriedades mecânicas menores.

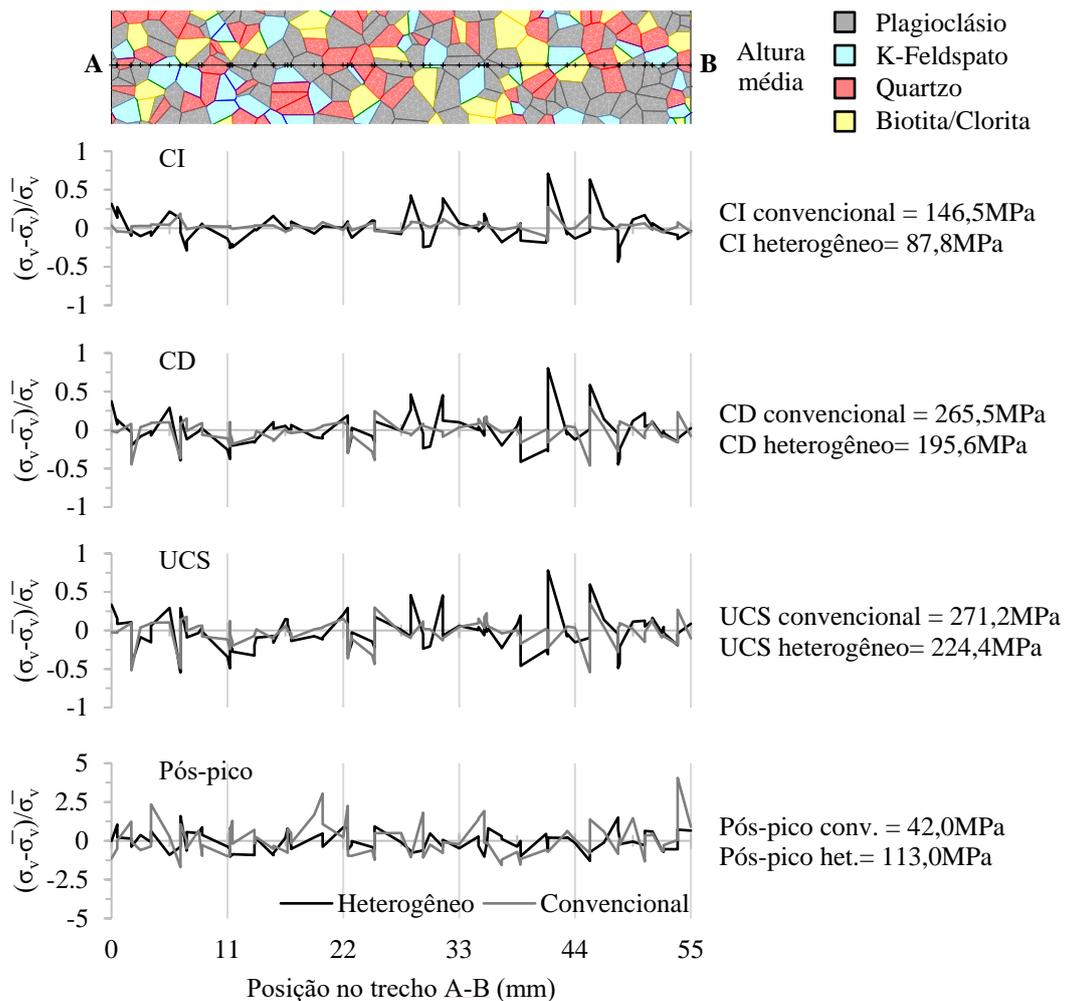


Figura 6.4. Desvio das tensões verticais medidas ao longo da largura A-B com relação ao valor médio para as duas versões do CVBM empregadas.

6.2. CVBM CONVENCIONAL CALIBRADO

Desde então, observou-se que a introdução de outras fontes de heterogeneidade no modelo de blocos Voronoi influencia especialmente o desenvolvimento das tensões internas, afetando diretamente o processo de criação e propagação dos diferentes tipos de fraturas e resultando numa diminuição da resistência do material.

Não obstante, o modelo convencional equivalente utilizado nas análises da seção anterior foi desenvolvido a partir da definição dos parâmetros empregados para a versão heterogênea calibrada. Nesta ocasião, o CVBM convencional foi ajustado seguindo um procedimento independente e análogo ao mostrado na Figura 4.1, aproveitando os corpos de prova usados para a Calibração 1.

De forma semelhante ao acontecido com os modelos heterogêneos, foi registrada a dependência das propriedades elásticas macroscópicas com relação ao fator α e à relação k_n/k_s para as variantes convencionais. No entanto, dada a maior flexibilidade na definição da deformabilidade dos elementos para este tipo de modelos, é possível modificar a disposição das curvas adotando, por exemplo um valor diferente de módulo de elasticidade para os blocos Voronoi, como mostrado nas curvas da Figura 6.5, de modo que o comportamento pode ser calibrado usando diferentes combinações dos parâmetros. Em geral, as observações apresentadas no Item 4.4.1, relacionadas aos efeitos de cada uma das propriedades sobre a resposta global do material, também são aplicáveis aos modelos convencionais utilizados para este caso.

O comportamento dos corpos de prova com os parâmetros ajustados da Tabela 6.2, se mostram na Figura 6.6 junto com os resultados da Calibração 1. Observa-se que o tipo de fraturamento acontecido para os novos modelos apresenta características similares aos modos de falha experimentados pelas amostras heterogêneas, porém, o desenvolvimento dos diferentes tipos de fraturas foi similar ao descrito para o CVBM convencional equivalente, registrando também uma maior quantidade de elementos plastificados por cisalhamento quando alcançada a condição residual.

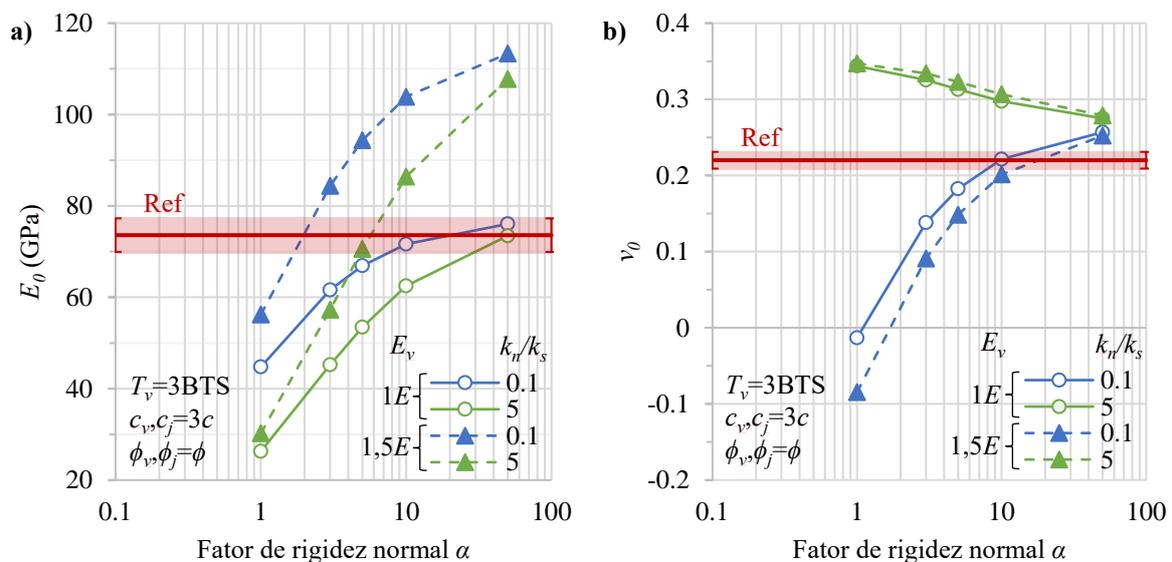


Figura 6.5. a) Módulo de Young e b) coeficiente de Poisson iniciais macroscópicos em função do parâmetro α , da relação k_n/k_s e do módulo E_v para o CVBM convencional.

Tabela 6.2. Propriedades do CVBM convencional calibradas para representar o comportamento do Diorito Äspö.

	Parâmetro		Valor	
	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Blocos Voronoi	E_v (GPa)	80,96	k_n (MPa/m)	2,44E+08
	ν_v	0,22	k_n/k_s	0,1
	c_v (MPa)	74,4	c_j (MPa)	31
	ϕ_v (°)	49	ϕ_j (°)	49
	T_v (MPa)	23,84	Juntas T_j (MPa)	26,9
	c_{rv} (MPa)	0	c_{rj} (MPa)	0
	ϕ_{rv} (°)	39	ϕ_{rj} (°)	39
	T_{rv} (MPa)	0	T_{rj} (MPa)	0
	ψ_v (°)	0	α	6,5

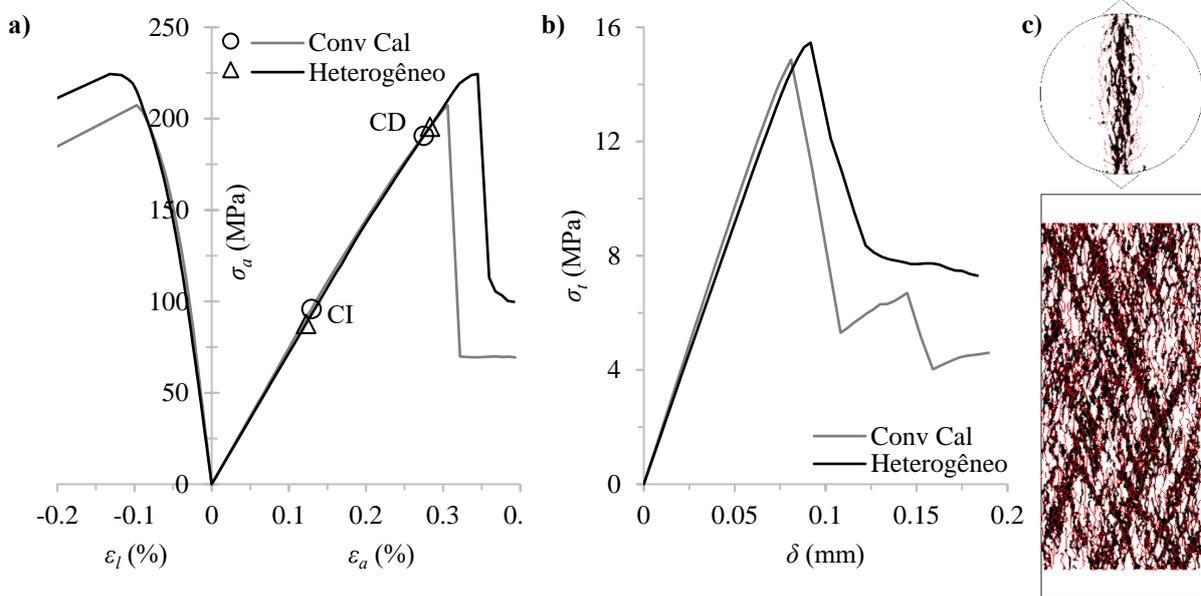


Figura 6.6. Comparativa entre o CVBM convencional e o CVBM heterogêneo calibrados para representar o comportamento do Diorito Äspö. Resultados dos modelos a) UCS e b) BTS, e c) tipo de fraturamento do modelo convencional.

Igualmente, foi identificada uma redução no comprimento da zona de crescimento instável das fraturas e um aumento da fragilidade do material logo de atingida a tensão de pico.

A Tabela 6.3 permite comparar as propriedades macroscópicas obtidas seguindo as duas abordagens do CVBM com os resultados dos ensaios de laboratório. Vale ressaltar que durante o ajuste dos modelos convencionais foi percebida uma maior dificuldade para aproximar simultaneamente as tensões características dentro da faixa de aceitabilidade definida com anterioridade, pelo que foram permitidos erros relativos um pouco maior para todos os atributos.

Tabela 6.3. Propriedades macroscópicas dos modelos calibrados para as duas variantes do CVBM consideradas.

Propriedade	Lab	Heterogêneo	Erro (%)	Convencional	Erro (%)
<i>Elasticidade</i>					
E_0 (GPa)	73,6	71,9	-2,33	74,4	1,12
ν_0	0,22	0,227	2,98	0,208	-5,23
<i>Tensões características e de pico</i>					
BTS (MPa)	14,9	15,5	3,77	14,9	-0,24
CI (MPa)	89,2	87,8	-1,62	95,9	7,51
CD (MPa)	189,2	195,6	3,37	190,6	0,74
UCS (MPa)	222,1	224,4	1,05	207,4	-6,64

Destacam as tensões CI e UCS como as propriedades que apresentaram as maiores diferenças com respeito dos valores experimentais, obtendo os erros relativos mais afastados da faixa do 5% usado como critério de parada. Isso pode ocorrer devido ao fato que as fraturas intergranulares agora são as dominantes durante a maior parte do carregamento da amostra, de modo que o aporte à deformabilidade outorgado pela plastificação dos elementos internos é menor, afetando o procedimento de ajuste e impactando indiretamente nos parâmetros calibrados.

6.3. CONCLUSÕES PARCIAIS

Como foi visto ao longo do capítulo, a variabilidade nas tensões internas produto da heterogeneidade material e de contatos exercem uma grande influência sobre o tipo de fraturas geradas e o seu desenvolvimento durante o processo de carregamento, afetando a mecânica interna do material e o comportamento macroscópico observado.

Da mesma forma, os resultados dos modelos convencionais sugerem que a consideração da heterogeneidade geométrica permite representar as características mais relevantes do comportamento da rocha, como a deformabilidade e a resistência do material, no entanto observou-se dificuldades na obtenção das outras propriedades macroscópicas avaliadas.

Assim, cada uma das fontes presentes no CVBM heterogêneo aporta na simulação efetiva da resposta da rocha para as diferentes condições de carregamento estudadas, ressaltando também que a capacidade de plastificação dos blocos é uma característica essencial na obtenção de um modelo mais realista, melhorando a representação do processo de fraturamento para estes tipos de materiais.

7. VARIABILIDADE ESPACIAL E ESTRUTURAL

Nos capítulos anteriores, foram utilizados os corpos de prova da Calibração 1 para analisar as diferentes características do CVBM heterogêneo e o impacto da mudança dos parâmetros e variáveis usados para a criação e o ajuste dos modelos. No entanto, a heterogeneidade material e de contatos exige uma avaliação da influência na disposição espacial dos diferentes tipos de minerais (variabilidade espacial) e da própria estrutura dos blocos Voronoi (variabilidade estrutural) sobre o comportamento geral do material simulado, a fim de estabelecer a capacidade do modelo para capturar a variabilidade natural da rocha. Cabe ressaltar que a mudança na configuração dos blocos provoca também a alteração na distribuição espacial dos diferentes tipos de minerais, pois a variabilidade estrutural permite uma análise mais aproximada da heterogeneidade real das rochas.

Dos trabalhos referenciados que empregam o CVBM convencional, apenas Rógenes *et al.* (2022) analisaram o impacto da mudança estrutural sobre a resposta geral dos modelos, ressaltando a obtenção dos maiores valores do coeficiente de variação (CV) para as tensões CD, UCS e BTS (13,68, 9,97 e 7,49%, respectivamente). Na presente seção são avaliados os efeitos de ambos os tipos de variabilidade nos parâmetros macroscópicos de controle definidos durante o procedimento de calibração, comparando os resultados com os dados experimentais obtidos da literatura para o tipo de rocha analisada.

7.1. CRIAÇÃO DOS MODELOS

Para cada variabilidade e tipo de ensaio considerado, foram gerados 30 corpos de prova com as propriedades obtidas na Calibração 1, conservando o conteúdo mineralógico e a geometria dos modelos apresentados no Capítulo 4. Nas amostras com variabilidade estrutural, foram aplicados os mesmos valores dos parâmetros usados para a criação dos blocos e da malha de elementos finitos ($\bar{l}_j = 1,05\text{ mm}$ e $\bar{l}_j / \bar{l}_m = 1,3$), obtendo curvas granulométricas similares às exibidas na Figura 4.6.

Por outro lado, para a criação dos corpos de prova com variabilidade espacial foi adotada a estrutura dos blocos Voronoi correspondente aos modelos empregados na Calibração 1, mudando apenas o valor da semente durante a atribuição pseudoaleatória dos minerais. Na Figura 7.1 é apresentado um exemplo das amostras geradas para cada condição de variabilidade, junto com o corpo de prova usado no procedimento de ajuste.

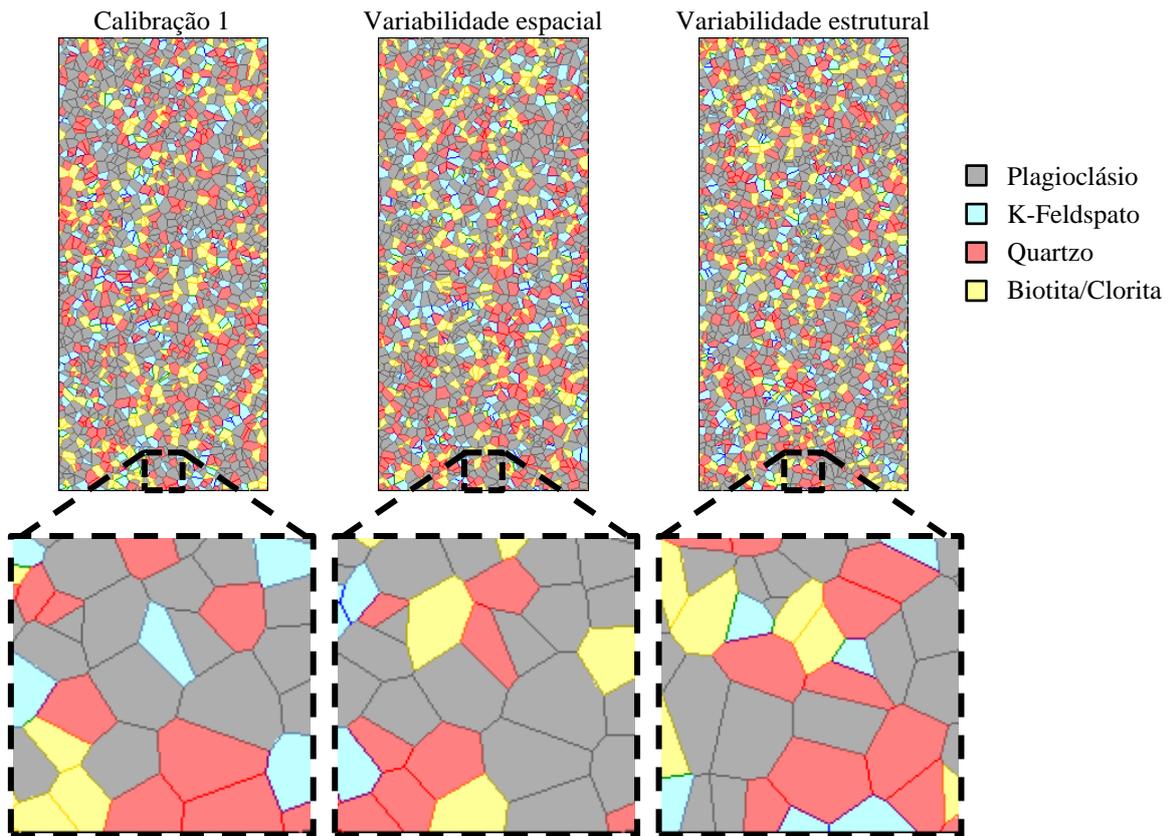


Figura 7.1. Exemplo de modelos UCS aplicando variabilidade espacial e estrutural.

7.2. RESULTADOS E ANÁLISE ESTATÍSTICA

Nas Figuras 7.2 e 7.3 são exibidos os resultados dos modelos de compressão simples e tração indireta levados a cabo para ambos os tipos de variabilidade, apresentando as curvas médias geradas a partir dos dados obtidos para cada caso. Percebe-se pouca dispersão de todas as curvas com relação ao comportamento médio, principalmente antes de atingir a tensão máxima, exibindo uma separação maior quando aplicada a variabilidade estrutural.

Mesmo assim, a maioria dos modelos de compressão simples encontram-se entre as linhas limites definidas com base nos ensaios experimentais levados a cabo por (Staub *et al.*, 2004), de modo que o CVBM heterogêneo consegue capturar a tendência geral do comportamento do Diorito Äspö para esta condição de carregamento.

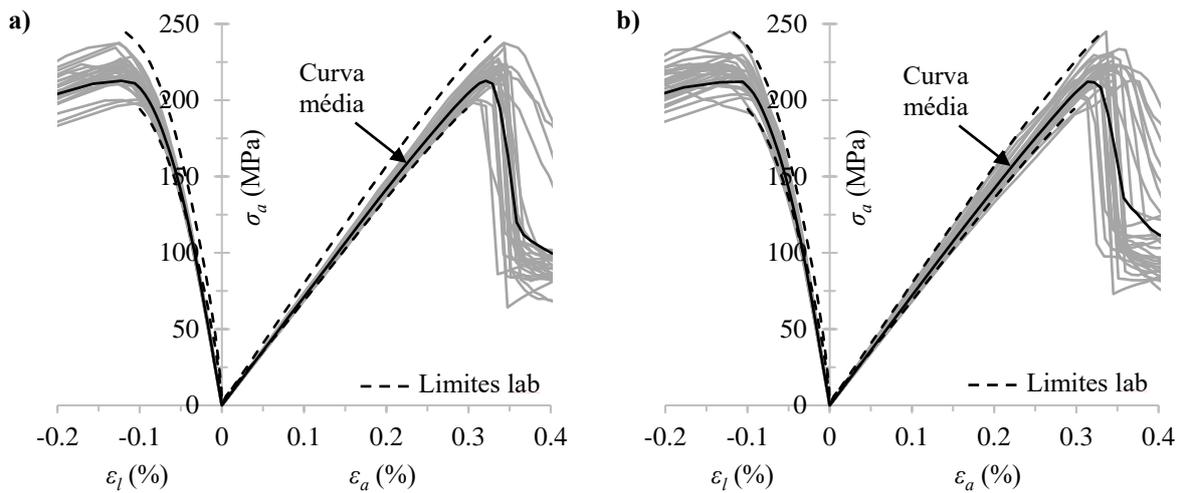


Figura 7.2. Curvas tensão-deformação para as simulações do ensaio UCS considerando a) a variabilidade espacial e b) a variabilidade estrutural. Linhas tracejadas representam as curvas máximas e mínimas experimentais obtidas por (Staub *et al.*, 2004).

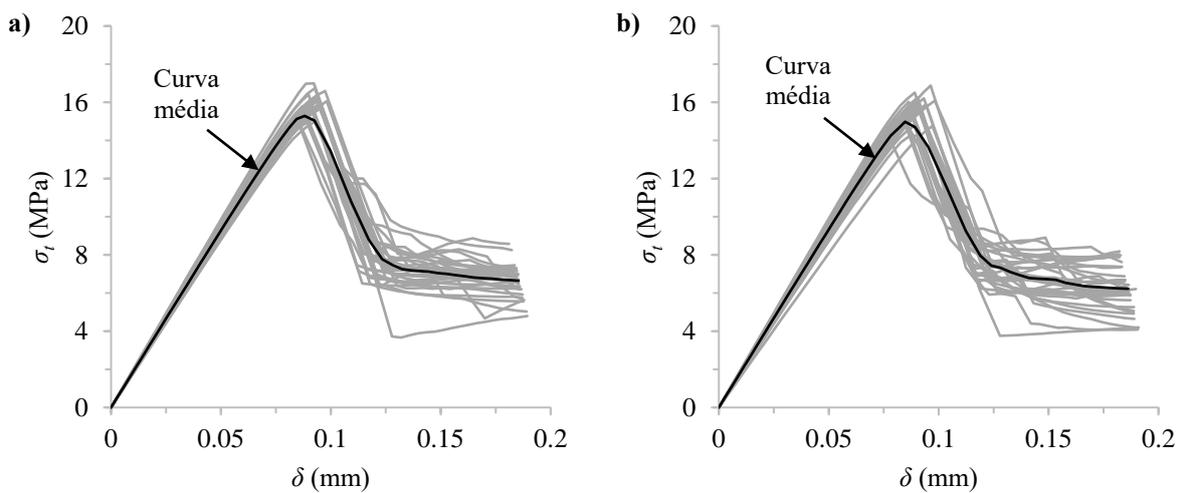


Figura 7.3. Curvas tensão-deslocamento para as simulações do ensaio BTS considerando a) a variabilidade espacial e b) a variabilidade estrutural.

A análise estatística das propriedades macroscópicas calculadas para todos os modelos (Anexo B) é apresentada na Tabela 7.1 junto com os valores obtidos das curvas médias definidas para cada condição, realizando a comparação com relação aos parâmetros médios experimentais reportados por Nordlund *et al.*, (1999) e Andersson (2007). Percebe-se que todas as propriedades analisadas apresentaram erros menores ao 10%, independentemente do tipo de variabilidade aplicada.

Tabela 7.1. Análise estatística do efeito da variabilidade espacial e estrutural na resposta macroscópica do modelo, comparada com os valores médios experimentais reportados por Nordlund *et al.* (1999) e Andersson (2007).

Parâmetro	Média lab	Variabilidade espacial						Variabilidade estrutural					
		Curva média	Erro (%)	Valor médio	Erro (%)	Desvio padrão	CV (%)	Curva média	Erro (%)	Valor médio	Erro (%)	Desvio padrão	CV (%)
E_0 (GPa)	76	71,31	-6,18	71,31	-6,18	1,32	1,85	71,97	-5,30	71,97	-5,30	2,40	3,33
ν_0	0,21	0,230	9,58	0,230	9,58	0,002	0,83	0,227	8,03	0,227	8,03	0,003	1,13
CI (MPa)	95	92,08	-3,07	91,50	-3,68	4,76	5,21	93,19	-1,90	90,97	-4,24	6,53	7,18
CD (MPa)	204	190,31	-6,71	192,14	-5,82	8,91	4,64	190,92	-6,41	194,24	-4,78	10,01	5,15
UCS (MPa)	211	212,69	0,80	218,97	3,78	9,48	4,33	212,09	0,51	220,39	4,45	8,66	3,93
BTS (MPa)	14,9	15,29	2,58	15,87	6,53	0,50	3,12	14,98	0,55	15,63	4,91	0,63	4,04

Avaliando os coeficientes de variação dos resultados, observa-se que a tensão de início de fraturas exibe a maior sensibilidade pela aplicação dos dois tipos de variabilidade, ocasionado provavelmente pela técnica utilizada na definição desta propriedade, a qual tem se visto altamente dependente dos parâmetros de elasticidade macroscópicos obtidos em cada caso (Ghazvinian, 2010; Nicksiar & Martin, 2012). Em seguida, as tensões CD, UCS e BTS, apresentaram valores de CV entre 3 e 5%, enquanto as propriedades elásticas mantiveram coeficientes de variação menores ao 3,5%.

Por outro lado, a obtenção de valores de CV menores ao 7,2% para todas as quantidades, indicam que a introdução da heterogeneidade material e de contatos melhoram a tendência geral do comportamento da rocha, quando comparado com as análises feitas para o CVBM convencional apresentado por Rógenes *et al.* (2022). Não obstante, é necessária uma avaliação mais exaustiva do desempenho de ambas as versões do modelo uma vez que sejam calibradas para representar um mesmo tipo de material.

Adicionalmente, na Figura 7.4 foram ilustradas as faixas de variabilidade dos parâmetros macroscópicos obtidos das modelagens numéricas comparadas com as dispersões encontradas nos ensaios de laboratório reportadas por Nordlund *et al.* (1999) e Andersson (2007). Nas mesmas gráficas também foram representados os valores médios experimentais e das simulações para ambos os tipos de variabilidade.

Constata-se que o modelo heterogêneo apresentou uma boa aderência ao comportamento global exibido em laboratório, sendo a resistência à tração por compressão diametral a propriedade que mostra o maior afastamento com relação à faixa experimental registrada.

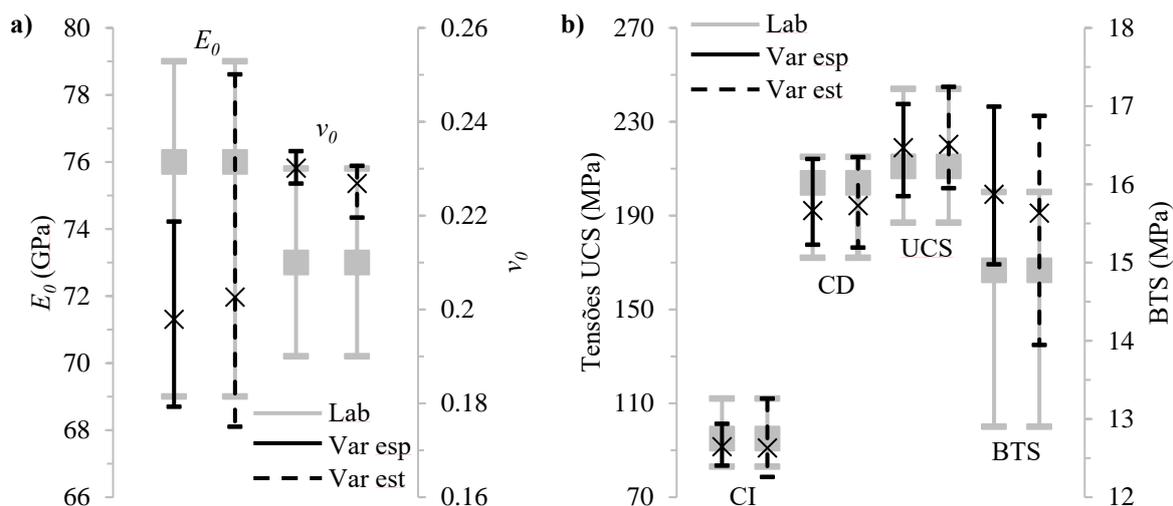


Figura 7.4. Faixas das a) propriedades de deformabilidade e b) das tensões macroscópicas dos modelos com variabilidade espacial e estrutural comparadas com as faixas experimentais apresentadas por Nordlund *et al.* (1999) e Andersson (2007).

7.3. CONCLUSÕES PARCIAIS

Ao longo deste capítulo foi avaliado o efeito da mudança na disposição espacial dos materiais e na estrutura dos blocos Voronoi sobre o comportamento do CVBM heterogêneo ajustado para representar o Diorito Äspö na escala de laboratório.

Embora o modelo foi calibrado inicialmente para aproximar a resposta de uma amostra particular da rocha, empregando um único conjunto de corpos de prova, foi possível capturar a variação natural do material quando aplicados ambos os tipos de variabilidade. Igualmente, o comportamento médio conseguido das simulações foi muito próximo aos valores médios reportados experimentalmente, não ultrapassando a barreira do 10% de erro para todas as propriedades consideradas.

Uma vez analisado os dados de coeficiente de variação, encontrou-se uma maior dispersão dos resultados para os modelos com variabilidade estrutural e uma maior sensibilidade das tensões características e máximas a qualquer tipo de alteração interna, destacando-se a tensão de início de fraturas por apresentar os valores de CV mais elevados nas duas condições examinadas.

Por fim, para os modelos gerados neste capítulo foram fixadas as porcentagens definidas para cada tipo de mineral considerado, podendo-se também avaliar a influência da variabilidade da composição mineralógica seguindo as faixas apresentadas na Tabela 4.2. Outra alternativa para

a realização desta análise resulta da extração dos corpos de prova a partir de uma amostra maior gerada seguindo as mesmas porcentagens empregadas neste trabalho, de forma que a variabilidade no conteúdo mineralógico surgiria da disposição particular dos minerais nas diferentes regiões da amostra.

8. MODELAGEM DO ENSAIO DE COMPRESSÃO CONFINADA

Nesta seção foi feita a análise da capacidade do modelo CVBM heterogêneo de simular o comportamento de rochas submetidas a compressão confinada (compressão biaxial), a transição frágil-dúctil e a dependência das deformações volumétricas com a tensão de confinamento.

Para isso foram empregados os resultados dos ensaios efetuados sobre amostras do Diorito Äspö reportados por Nordlund *et al.* (1999) para diferentes tensões de confinamento. Os valores de tensão máxima são apresentados na Figura 8.1, junto com as envoltórias de ruptura de Hoek-Brown (H-B) e de Mohr-Coulomb equivalente (M-C). Neste caso, para os resultados de tração indireta foi aplicado o fator de 0,85 para determinar a resistência a tração direta mostrada na figura, como sugerido por Perras & Diederichs (2014) e adotado por Walton (2014), Rasmussen (2018) e Rógenes *et al.* (2022), entre outros.

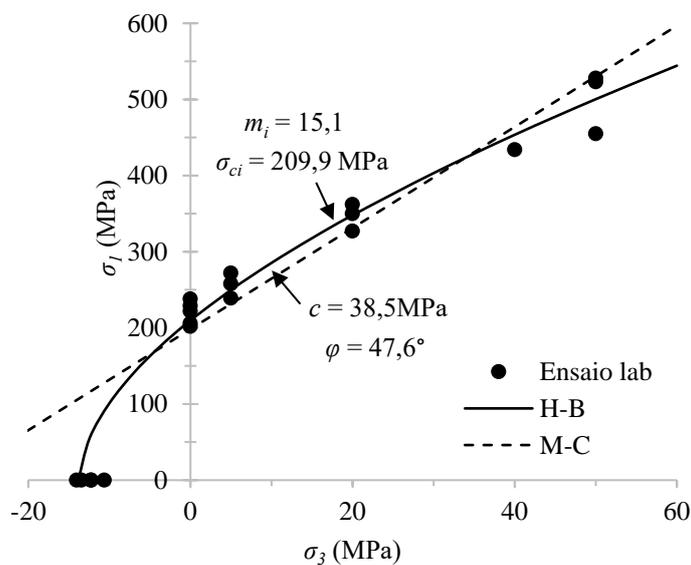


Figura 8.1. Envoltórias de ruptura de H-B e de M-C equivalentes para os resultados de compressão confinada efetuados em amostras do Diorito Äspö.

8.1. ENSAIOS DE COMPRESSÃO CONFINADA COM A CALIBRAÇÃO INICIAL

Uma vez obtida a calibração para os estados de compressão não confinada e tração indireta, foram realizadas as simulações dos ensaios de compressão biaxial empregando o mesmo corpo

de prova e parâmetros da Calibração 1 (Figura 4.5-a), aplicando a tensão de confinamento ao longo de todo o contorno do modelo. Os resultados para as tensões de confinamento de 5, 20, 40 e 50 MPa se apresentam nas Figuras 8.2 e 8.3 acrescentados com os resultados de compressão simples obtidos com anterioridade.

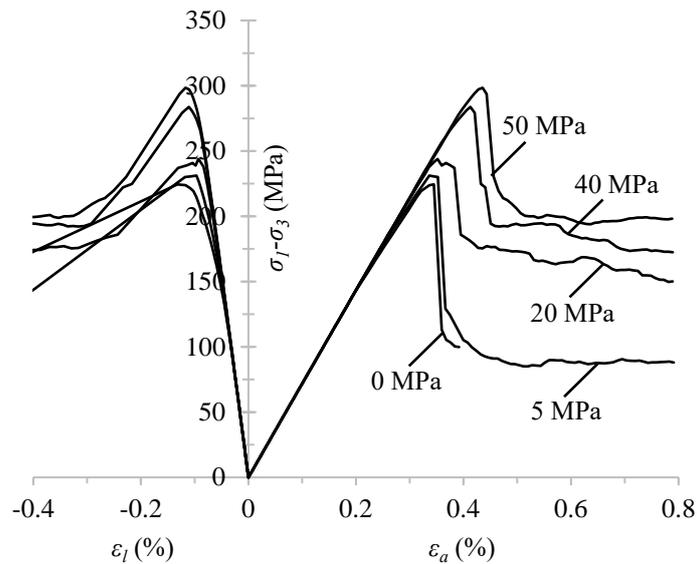


Figura 8.2. Curvas tensão-deformação dos ensaios confinados para os modelos com a calibração inicial.

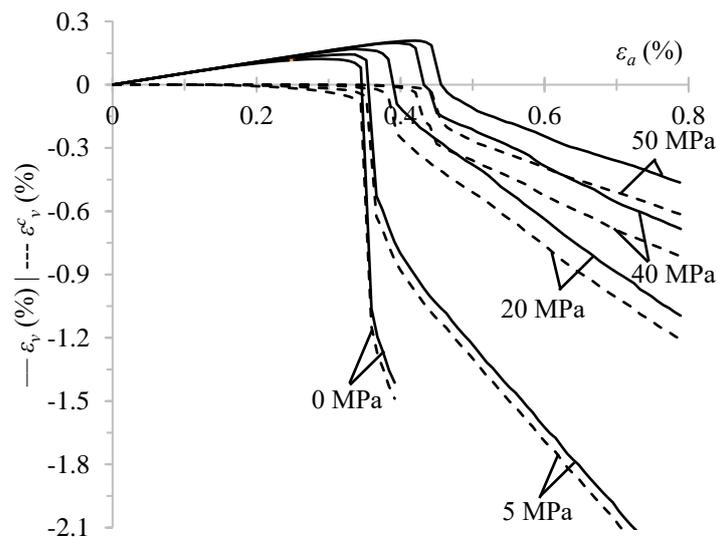


Figura 8.3. Curvas de deformações volumétricas dos ensaios confinados para os modelos com a calibração inicial.

As curvas de tensão-deformação mostram um comportamento frágil independente da tensão de confinamento, mantendo uma queda de resistência parecida para todas as curvas logo de atingida a tensão de pico. Nota-se também que as características do trecho elástico permanecem para os diferentes valores de σ_3 , comportamento esperado, pois o modelo não considera variabilidade do módulo de elasticidade com o confinamento e nem permite a introdução explícita de microfaturas abertas. Por outro lado, as curvas de deformações volumétricas exibem uma dependência com a tensão de confinamento, ocorrendo uma diminuição da taxa pós-pico de todas as curvas conforme a tensão σ_3 aumenta. Vale ressaltar que a deformação volumétrica obtida decorre da mobilização dos blocos sem intervenção do comportamento do material dos blocos ($\psi_v = 0$).

A Figura 8.4 apresenta os resultados de tensão máxima, CI e CD para todos os modelos biaxiais no plano $\sigma_1 - \sigma_3$, além do resultado de tração indireta minorado. Nota-se que o modelo consegue representar o valor de tensão máxima até uma tensão de confinamento de 5 MPa e o acréscimo do valor de CI com o confinamento. Entretanto para σ_3 elevados, a tensão de pico não aumenta com a taxa esperada e os valores de CD ficam muito próximos deles, evidenciando a carência da região de plastificação e da representação da transição frágil-dúctil. Por outro lado, na Figura 8.5 observa-se o fraturamento do corpo de prova para as diferentes tensões de confinamento, exibindo uma menor participação das fraturas intergranulares e a mudança do tipo de ruptura de tração para cisalhamento à medida que aumenta a tensão σ_3 .

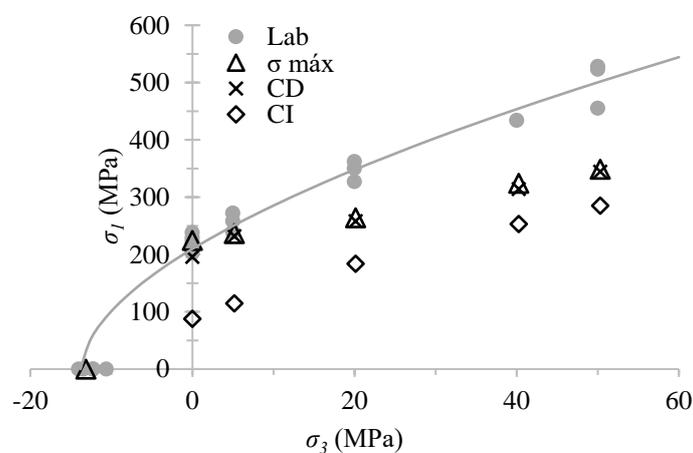


Figura 8.4. Resultados dos modelos com a calibração inicial.

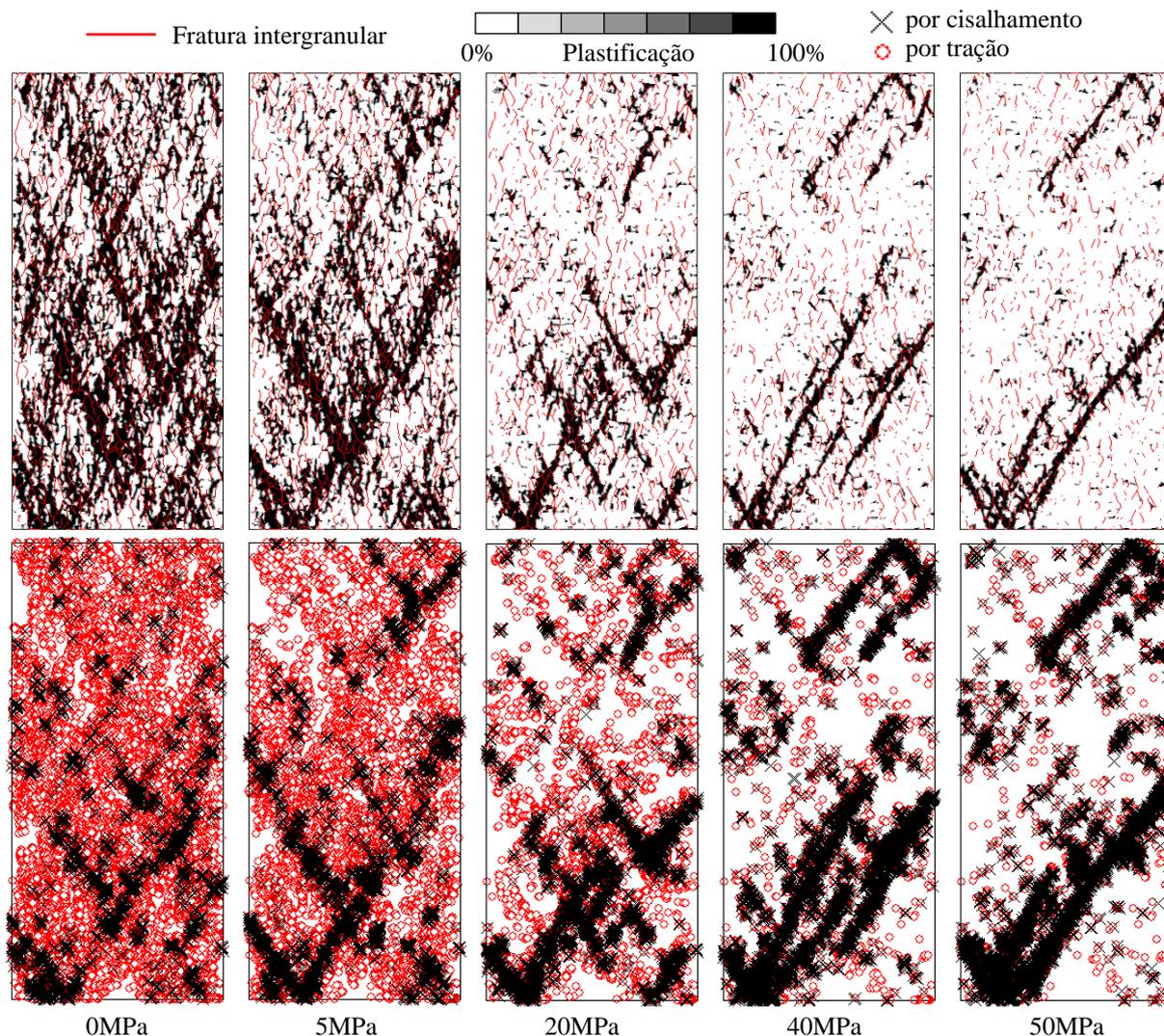


Figura 8.5. Fraturamento dos modelos de compressão confinada com os parâmetros da calibração inicial.

8.2. ENSAIOS DE COMPRESSÃO CONFINADA COM A CALIBRAÇÃO AJUSTADA

Posto que os resultados de compressão confinada não foram satisfatórios, foi realizada uma adaptação da calibração inicial mudando os parâmetros que foram pouco relevantes para o ajuste dos ensaios de compressão simples e tração indireta, estes parâmetros foram: ψ_v , ϕ_v , ϕ_{rv} , ϕ_j , ϕ_{ij} e c_{rv} . Cabe destacar que foram mantidos os valores nulos de T_{rv} , T_{ij} e c_{ij} , de forma que a coerência mecânica seja mantida. Adicionalmente foi observado que nos parâmetros obtidos da calibração, a resistência à tração dos blocos ficou menor que à calculada para as juntas (Figura 8.6-a). Esta condição é incoerente com a hipótese de que os blocos de minerais apresentam características de resistência maiores que aquelas das juntas, embora nos ensaios

de compressão simples, a maioria das fraturas desenvolvidas antes da tensão de pico foram nestes últimos elementos.

Na sequência é feito o resumo do efeito do acréscimo de cada um dos parâmetros mencionados em relação ao comportamento obtido utilizando a calibração inicial:

- Coesão residual dos blocos: aumenta a resistência de pico para todos os ensaios, especialmente para aqueles confinados, resultando no acréscimo do ângulo de atrito equivalente. O tipo de fraturamento obtido no ensaio de compressão simples é mantido independentemente da tensão confinante, aumentando o número de fraturas intergranulares. Ocorre a transição frágil para dúctil, aumentando a zona de plastificação pré-pico com a tensão de confinamento e diminuindo a perda de resistência da região pós-pico.
- Ângulo de atrito de pico dos blocos: aumenta o ângulo de atrito equivalente devido a uma maior queda na resistência à medida que diminui a tensão de confinamento. Surge uma transição suave entre a tensão de pico e residual para a tensão de confinamento maior, não obstante o comportamento frágil é mantido para as tensões menores. O tipo de fratura no caso de compressão simples, assemelha-se mais ao conhecido como *axial splitting*, causado principalmente pela plastificação dos blocos na direção axial, diminuindo drasticamente o número de fraturas pelas juntas e a quantidade de blocos plastificados. Para os ensaios confinados, promove a mudança no tipo de fraturamento para cisalhante, porém gera uma maior ruptura das juntas comparado ao ensaio não confinado.

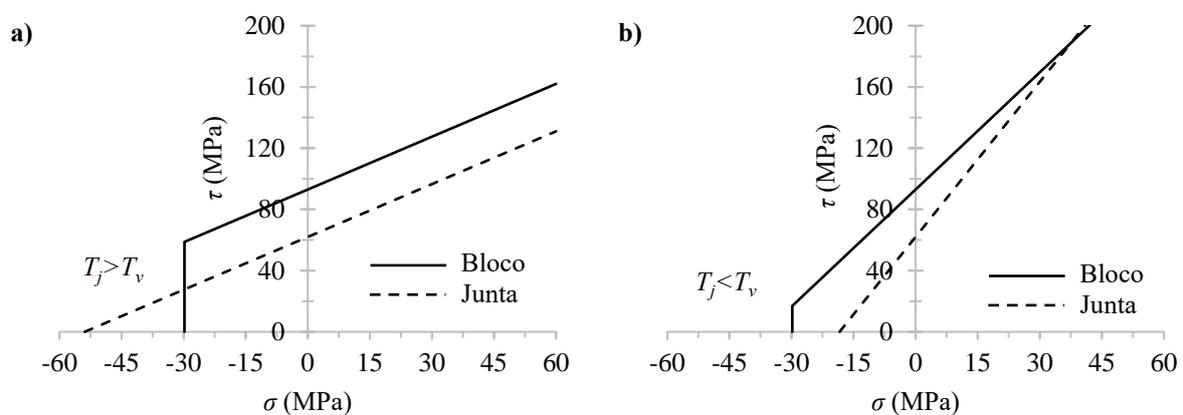


Figura 8.6. Critério de ruptura de M-C para os blocos Voronoi e as juntas na a) calibração inicial e na b) calibração ajustada.

Aumentar o ângulo de atrito tanto dos blocos quanto das juntas, permite manter o comportamento descrito anteriormente com a diferença da redução do número de fraturas intergranulares com o confinamento.

- Ângulo de atrito de pico das juntas: aumenta a resistência de pico no ensaio de compressão simples e diminui o número de fraturas intergranulares com a tensão de confinamento. Nota-se uma perda de fragilidade no comportamento pós-pico para a tensão de confinamento maior, acontecendo uma transição mais suave entre a tensão máxima e a tensão residual.
- Ângulo de dilatância: aumenta levemente a resistência de pico e residual na condição confinada, mantendo o tipo de fratura inicial. A taxa de deformação volumétrica pós-pico aumenta pelo aporte da deformação dos blocos.
- Ângulos de atrito residual dos blocos e juntas: aumenta a resistência para todas as tensões de confinamento e ocorre a transição frágil-dúctil. O tipo de fraturamento é similar em todos os casos, no entanto, a quantidade de juntas e blocos danificados diminui com o aumento da tensão σ_3 .

A Tabela 8.1 apresenta os valores dos parâmetros de resistência para a calibração ajustada considerando o comportamento em condição confinada, ressaltando aqueles valores que foram alterados com base na calibração inicial. Neste caso, uma resistência a tração de pico dos blocos maior que a resistência a tração das juntas foi garantida durante o ajuste (Figura 8.6-b).

Tabela 8.1. Parâmetros de resistência calibrados para os blocos Voronoi e as juntas com base nos modelos de tração indireta, compressão confinada e não confinada.

		Parâmetro	Valor	Fator ^a			Parâmetro	Valor	Fator ^a
Blocos Voronoi		c_v (MPa)	93	3	Juntas		c_j (MPa)	62	2
		ϕ_v (°)	68,6	1,4			ϕ_j (°)	73,5	1,5
		T_v (MPa)	29,8	2			T_j (MPa)	18,4	1,23^b
		c_{rv} (MPa)	37,2	1,2			c_{rj} (MPa)	0	-
		ϕ_{rv} (°)	39	0,8			ϕ_{rj} (°)	39	0,8
		T_{rv} (MPa)	0	-			T_{rj} (MPa)	0	-
		ψ_v (°)	10	-			-	-	-

^aFator com relação ao valor de laboratório

^bDepende de outros parâmetros

De igual forma, nas Figuras 8.7 e 8.8 são apresentadas as curvas tensão-deformação e de deformações volumétricas. Nota-se uma perda da fragilidade nas curvas para tensões de confinamento baixas quando comparadas com os resultados de calibração iniciais, assim como também, um acréscimo da tensão residual, uma maior zona de plastificação na região anterior à tensão de pico e uma menor taxa de deformação volumétrica pós-pico do material.

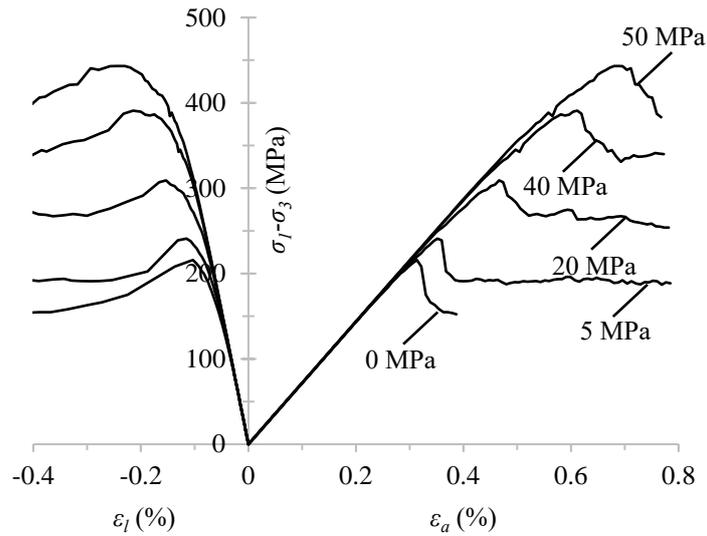


Figura 8.7. Curvas tensão-deformação dos ensaios confinados para os modelos com a calibração ajustada.

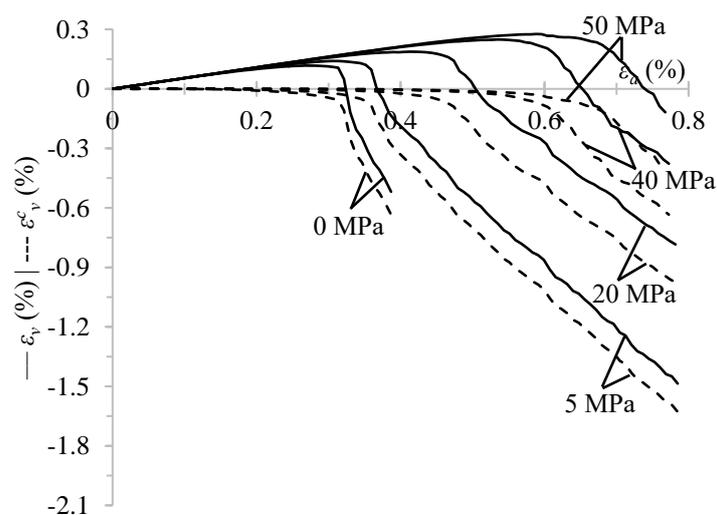


Figura 8.8. Curvas de deformações volumétricas dos ensaios confinados para os modelos com a calibração ajustada.

A Figura 8.9 mostra as tensões características plotadas no espaço $\sigma_1 - \sigma_3$ para os modelos com a nova calibração, evidenciando uma melhor aproximação dos valores máximos respeito à envoltória de ruptura experimental e maiores valores da tensão CD para todos os níveis de confinamento. Entretanto as superfícies de fratura conseguidas não parecem acompanhar o efeito do confinamento apesar da redução na quantidade de juntas danificadas (Figura 8.10).

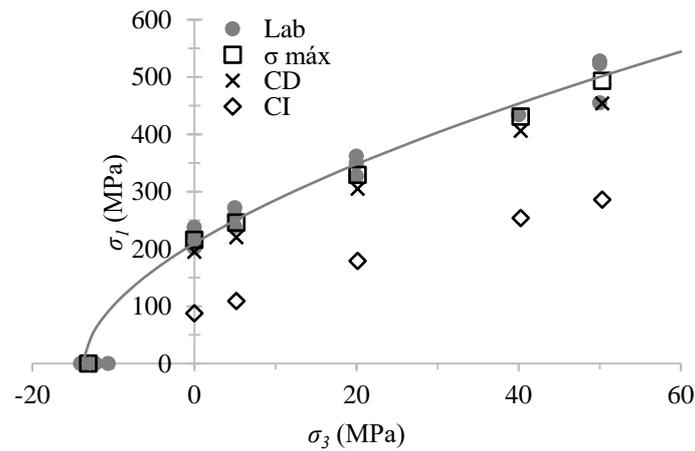


Figura 8.9. Resultados dos modelos com a calibração ajustada.

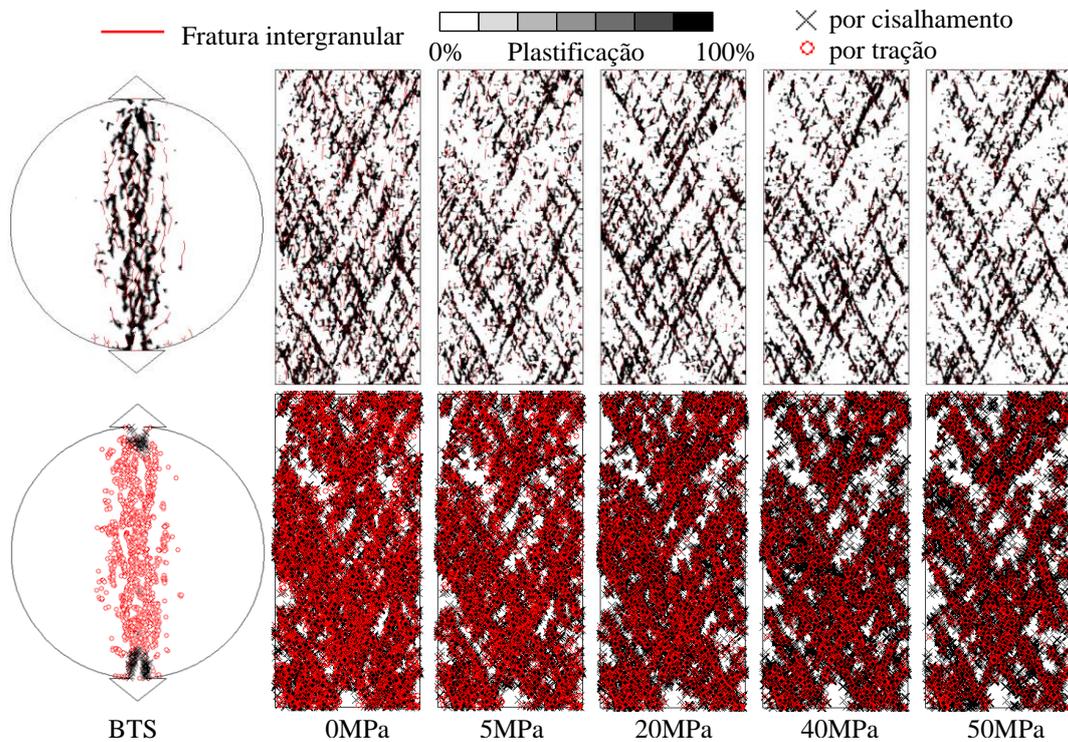


Figura 8.10. Fraturamento dos modelos com os parâmetros da calibração ajustada.

8.3. VARIABILIDADE ESTRUTURAL NOS MODELOS DE COMPRESSÃO CONFINADA

Para obter indícios do efeito da variabilidade estrutural nos resultados de compressão confinada, foram realizados dois modelos adicionais submetidos a todas as tensões de confinamento, tanto para os modelos com a calibração inicial quanto com a calibração ajustada. Foi escolhido este tipo de variabilidade afinal, como foi mostrado no capítulo anterior, representa uma condição mais geral da mudança na estrutura interna do material.

Na Tabela 8.2 é feita a análise estatística dos valores obtidos para todos os modelos implementados. Os resultados conseguidos com a nova calibração parecem ser os mais consistentes para as três tensões de referência consideradas, indicando que as modificações feitas provocam uma homogeneização do comportamento do material, resultando na forma de ruptura permanente evidenciada na Figura 8.10 para os diferentes níveis de confinamento.

Na Figura 8.11 se apresentam as envoltórias de ruptura de H-B para os resultados de laboratório e para os modelos, tanto com a calibração inicial quanto com a calibração ajustada, considerando os três corpos de prova simulados. Adicionalmente, foram criados dois modelos de tração indireta com cada uma das configurações de parâmetros avaliadas, obtendo valores de resistência à tração muito similares para ambas as calibrações.

Tabela 8.2. Tensões características e máximas médias para ambos os conjuntos de parâmetros de calibração.

Calibração	Ensaio	CI (MPa)		CD (MPa)		$\sigma_{m\acute{a}x}$ (MPa)	
		Média	CV (%)	Média	CV (%)	Média	CV (%)
Inicial	BTS	-	-	-	-	15,38	2,55
	0 MPa	78,93	10,53	208,72	6,12	233,37	3,38
	5 MPa	109,98	7,56	227,39	5,61	243,58	3,23
	20 MPa	170,55	19,48	268,49	5,26	274,96	6,16
	40 MPa	198,73	25,90	321,20	2,16	329,26	2,49
	50 MPa	268,71	18,35	346,55	1,33	353,74	2,68
Ajustada	BTS	-	-	-	-	15,11	1,63
	0 MPa	86,47	2,72	196,27	0,77	215,45	1,87
	5 MPa	110,21	0,98	227,98	2,92	246,08	0,56
	20 MPa	182,26	1,76	306,02	0,39	329,69	2,67
	40 MPa	264,88	3,87	413,87	2,12	433,53	2,15
	50 MPa	297,30	3,53	469,90	3,12	498,44	1,15

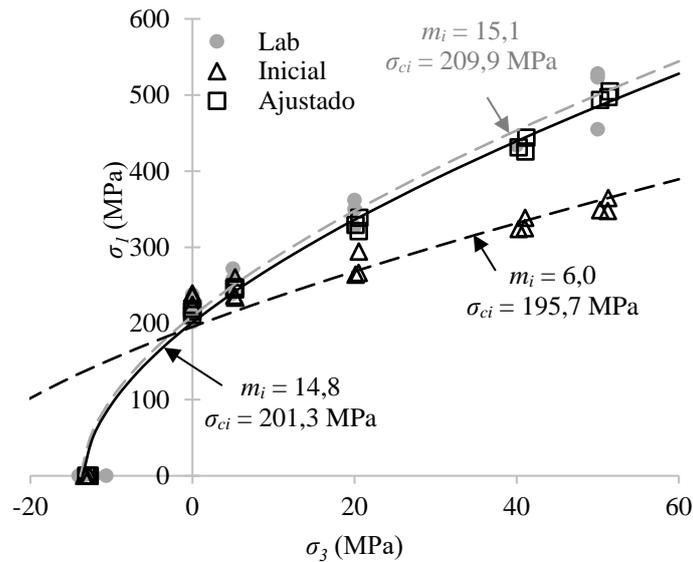


Figura 8.11. Envoltórias de ruptura de H-B para os resultados de laboratório e dos modelos usando ambas as calibrações.

8.4. CONCLUSÕES PARCIAIS

Neste capítulo foi avaliada a capacidade do CVBM heterogêneo para representar o comportamento das rochas na condição de compressão confinada. Os modelos foram desenvolvidos para simular as tensões máximas atingidas pelo Diorito Äspö, aplicando diferentes tensões de confinamento no estado biaxial de carregamento.

Ao longo do decorrer das simulações foi observada a necessidade de modificar os parâmetros calibrados inicialmente, ajustando aquelas propriedades não consideradas durante o procedimento apresentado na Seção 4.1. Assim, foi descrita a influência de cada variável sobre o tipo de fraturamento, a transição frágil-dúctil e as tensões máximas conseguidas, destacando a coesão residual dos blocos como uma das propriedades mais relevantes na calibração do comportamento do material sob confinamento.

Os resultados mostraram que com o conjunto de parâmetros obtidos na Calibração 1, os modelos não conseguiram atingir as tensões de pico esperadas, porém, foi capturada a mudança no modo de ruptura com o aumento da tensão σ_3 . Caso contrário aconteceu com os valores reajustados, onde uma vez reproduzidas as tensões máximas, os corpos de prova não exibiram uma mudança significativa no tipo de falha, mostrando só uma redução no número de elementos internos plastificados por tração com o confinamento.

Por outro lado, a envoltória de ruptura obtida para os modelos reajustados mostrou-se muito próxima daquela que representa o comportamento de laboratório, resultando em erros de -4,1 e 2% quando são comparados os parâmetros σ_{ci} e m_i , respectivamente.

Uma vez aplicada variabilidade estrutural para as diferentes condições de confinamento, evidenciou-se que a tensão de início das fraturas foi a propriedade mais susceptível à alteração do arranjo interno do material. Igualmente, foi percebido que os resultados para os modelos com a nova calibração apresentaram coeficientes de variação menores ao 4%, exibindo um comportamento muito uniforme apesar da tensão de confinamento aplicada.

Finalmente, dadas as dificuldades na representação simultânea do modo de ruptura e do comportamento mecânico da rocha quando aplicado o confinamento, se faz necessário considerar a possibilidade de incluir esta condição de carregamento durante o processo de calibração, ajustando as tensões características e de pico na procura de uma definição integral da resposta do material simulado.

9. APLICAÇÕES ADICIONAIS DO CVBM HETEROGÊNEO

Para finalizar, neste capítulo são recopilados alguns dos resultados preliminares da utilização do CVBM heterogêneo nas análises do comportamento das rochas para algumas condições particulares. O objetivo desta seção consiste em proporcionar ao leitor uma vista geral das capacidades do método para o estudo de rochas submetidas a carregamento cíclico, a análise das tenacidades de fratura, a representação de rochas amigdaloides e foliadas, ou a adaptação para uma abordagem probabilística, servindo como estímulo para o desenvolvimento de pesquisas futuras.

9.1. CARREGAMENTO CÍCLICO

Foi avaliada a possibilidade de simular o dano progressivo da rocha quando submetida a carregamento cíclico empregando o CVBM heterogêneo. Neste caso, aproveitou-se o modelo de compressão simples ajustado na Calibração 1 para analisar dois cenários de carga, aplicando tensões verticais máximas de 150 e 200 MPa seguindo uma função linear durante 5 ciclos. Estes valores foram escolhidos para superar as tensões características CI e CD calculadas previamente (Tabela 4.8), permitindo estabelecer o desenvolvimento das fraturas ao interior do corpo de prova após de cada período atingido.

Nas Figuras 9.1 e 9.2 são apresentados os resultados para a tensão vertical máxima de 150 MPa. Nota-se que o modelo conseguiu capturar vários dos fenômenos registrados experimentalmente, como por exemplo o rápido desenvolvimento das deformações laterais, o acúmulo das deformações irreversíveis e a tendência dilatante trás vários ciclos de carregamento (Cerfontaine & Collin, 2018; Y. Liu & Dai, 2021).

De igual forma, a tensão aplicada provocou a geração de fraturas majormente intergranulares após o primeiro período de carga, mostrando-se um acréscimo na quantidade de fraturas intragranulares e transgranulares com o decorrer do ensaio.

As Figuras 9.3 e 9.4 mostram os resultados do modelo onde foi adotada a tensão vertical de 200 MPa. A curva tensão-deformação exhibe, claramente, o rápido aumento das deformações laterais, acontecendo a ruptura do corpo de prova no começo do terceiro descarregamento. A falha vertiginosa do material obedece ao rápido desenvolvimento dos diferentes tipos de fraturas em todas as regiões da amostra e a que a tensão máxima utilizada atinge a região de crescimento instável das fraturas.

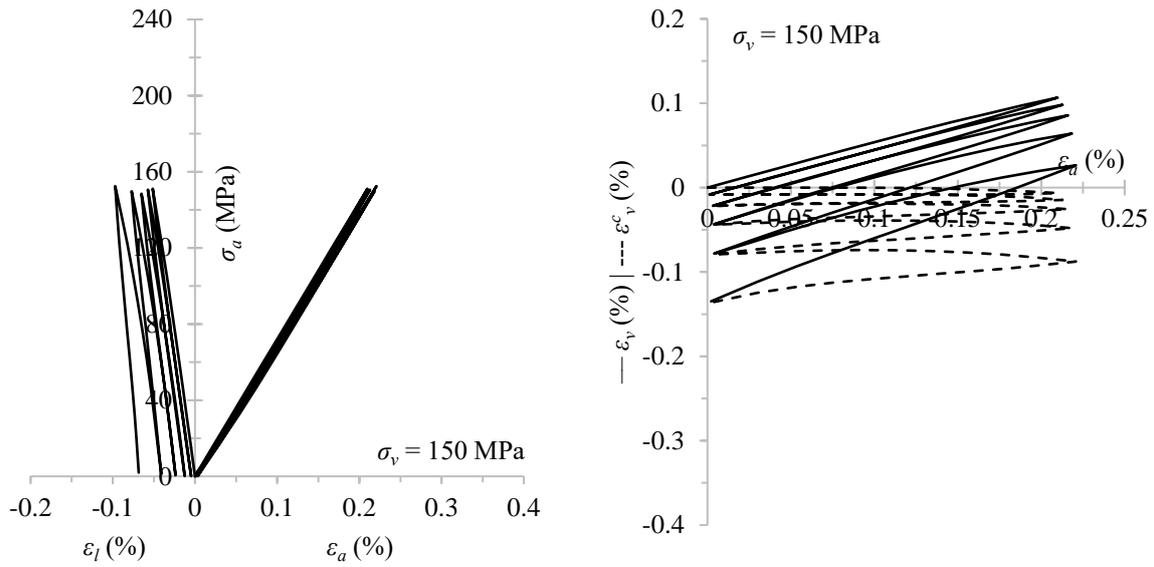


Figura 9.1. Resposta do modelo ao carregamento cíclico de compressão para uma tensão vertical máxima aplicada de 150 MPa.

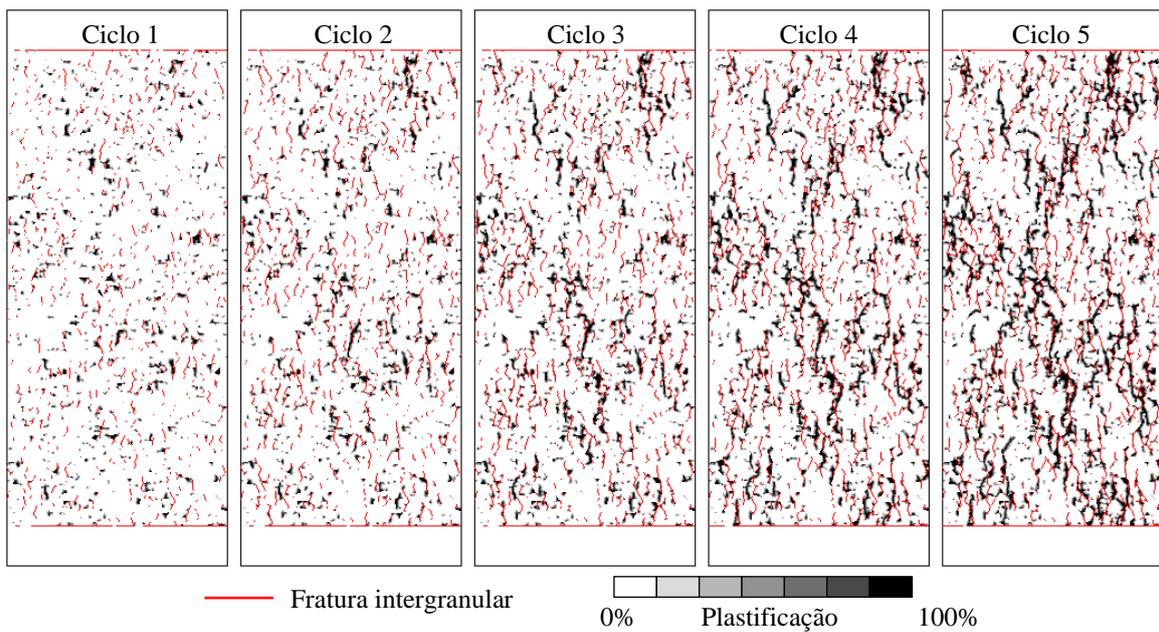


Figura 9.2. Dano ocorrido no corpo de prova após cada ciclo de carregamento para uma tensão vertical máxima aplicada de 150 MPa.

Esta ruptura acelerada do corpo de prova também é característica do tipo de material analisado, já que, como mencionado por Y. Liu & Dai (2021), uma vez que as rochas frágeis são submetidas a uma tensão e amplitude elevadas, as deformações axiais permanentes aumentam rapidamente, provocando a falha por fadiga com poucos ciclos de carregamento. Percebe-se

também que a forma de ruptura desenvolvida apresenta características similares ao tipo de falha encontrado para o modelo monotônico, prevalecendo o domínio das fraturas por tração sobre os elementos plastificados por cisalhamento.

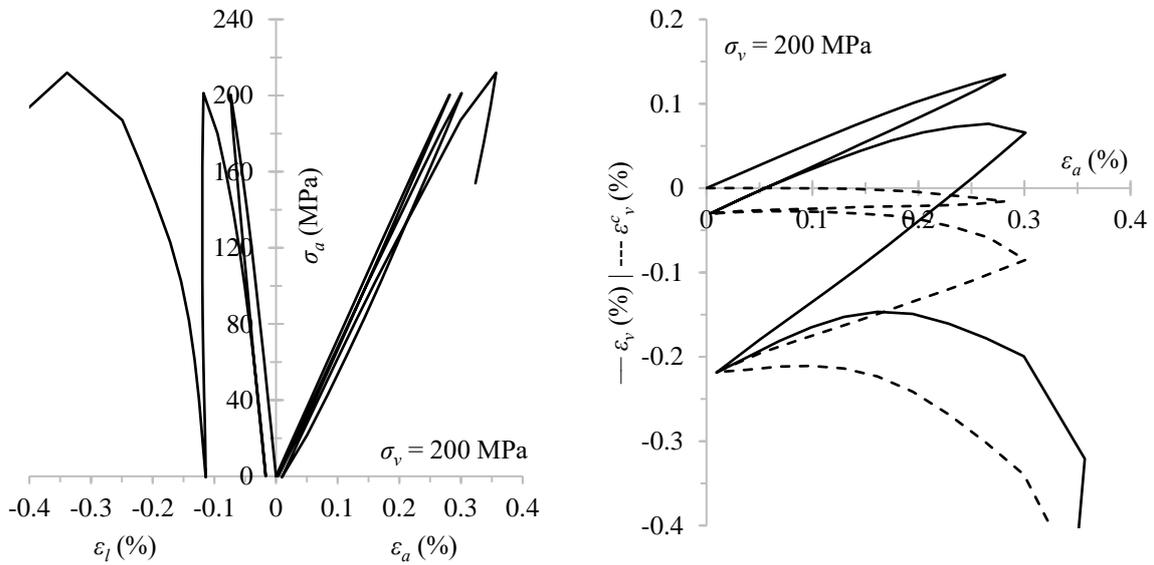


Figura 9.3. Resposta do modelo ao carregamento cíclico de compressão para uma tensão vertical máxima aplicada de 200 MPa.

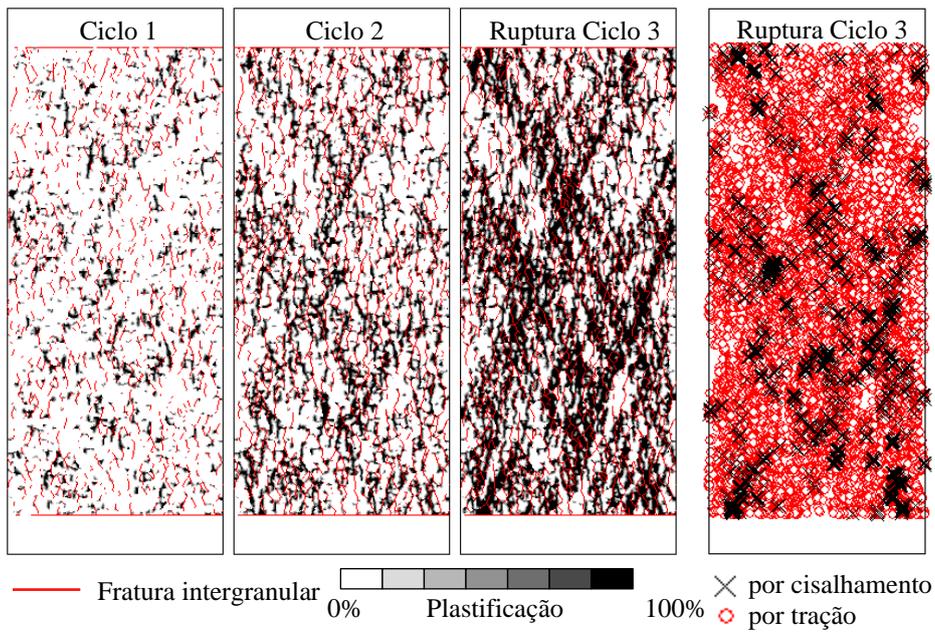


Figura 9.4. Dano ocorrido no corpo de prova após cada ciclo de carregamento para uma tensão vertical máxima aplicada de 200 MPa.

9.2. ENSAIOS DE TENACIDADE DA FRATURA

Além de analisar o comportamento das rochas quando submetidas a diferentes tipos de carregamentos, o estudo do processo de fraturamento também é de grande importância para prever ou advertir da ruptura das obras que envolvem este tipo de materiais. Neste sentido, a mecânica da fratura tem desenvolvido várias técnicas analíticas, numéricas e experimentais para determinar a resistência das rochas à propagação das fraturas (Sun & Jin, 2012).

Tradicionalmente, para os materiais homogêneos, o desenvolvimento das fraturas pode ser causado por três mecanismos principais: abertura, cisalhamento no plano e cisalhamento fora do plano, definindo os Modos de fraturamento I, II e III, respectivamente (Figura 9.5).

Dado que as rochas geralmente são materiais heterogêneos, a propagação das fraturas está influenciada pelas interfaces entre partículas, as imperfeições e outras discontinuidades presentes na estrutura mineralógica, acontecendo uma mistura dos modos de fraturamento na escala correspondente (Backers & Stephansson, 2015). Mesmo assim, desde o ponto de vista macroscópico, cada um dos modos tem sido considerado de forma isolada segundo o tipo de carregamento desenvolvido pelas forças externas aplicadas.

Para que a fratura possa se propagar no meio, a tensão na frente da sua ponta deve atingir um valor crítico, definido para cada material e condição de carregamento. Esta tensão pode ser calculada em termos do fator de intensidade de tensão K , sendo a tenacidade da fratura K_C o seu valor limite, representando a resistência da rocha ao modo de fraturamento específico. Os diferentes valores de K_C podem ser estimados a partir dos resultados de ensaios experimentais, onde o material é submetido a um ou vários modos de fraturamento simultaneamente.

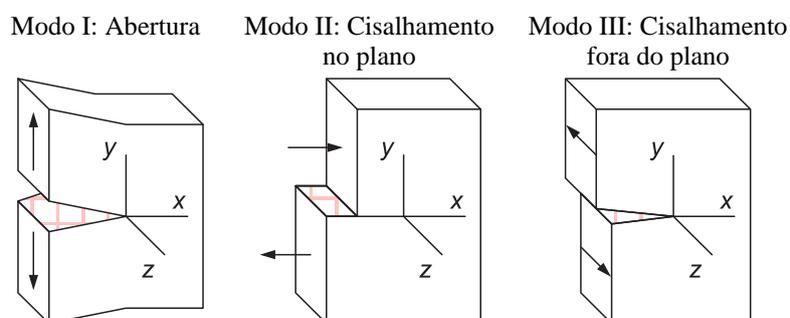


Figura 9.5. Modos de fraturamento experimentados de acordo com tipo de carregamento aplicado. Adaptado de Sun & Jin (2012).

Dadas as características do CVBM heterogêneo para integrar várias fontes de heterogeneidade e a sua capacidade para simular o comportamento das rochas em laboratório, também foi avaliada a possibilidade de empregar este modelo na análise da resposta destes materiais quando representados alguns ensaios de tenacidade de fratura.

Staub *et al.* (2004) reportaram os resultados dos ensaios de Flexão em amostra tipo Chevron (*Chevron-Bend test - CB test*) e de Cisalhamento perfurante (*Punch Through Shear test – PTS test*) efetuados para determinar as tenacidades de fratura no Modo I e II para o Diorito Äspö. Os valores médios encontrados para cada caso foram de 3,8 e 4,6 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$, respectivamente.

Aproveitando as propriedades ajustadas durante a Calibração 1, foram gerados dois modelos equivalentes aos ensaios executados experimentalmente. Assim, foram criados os corpos de prova para simular o carregamento por Flexão de três pontos (*Three-Point Bending test - 3PB test*) e Cisalhamento perfurante não confinado mostrados na Figura 9.6, aplicando os deslocamentos pertinentes representados pelas setas azuis. Não obstante, importa recordar que estes modelos apresentam uma condição de carregamento em deformação plana, diferente do estado tridimensional experimentado pelas amostras reais, de modo que as análises seguintes estão baseadas numa avaliação qualitativa do fraturamento acontecido em cada caso.

De forma geral, os resultados das simulações mostraram um processo de falha similar ao reportado experimentalmente para ambos os cenários examinados, evidenciando o desenvolvimento de uma força de reação máxima necessária para a determinação das tenacidades de fratura correspondentes.

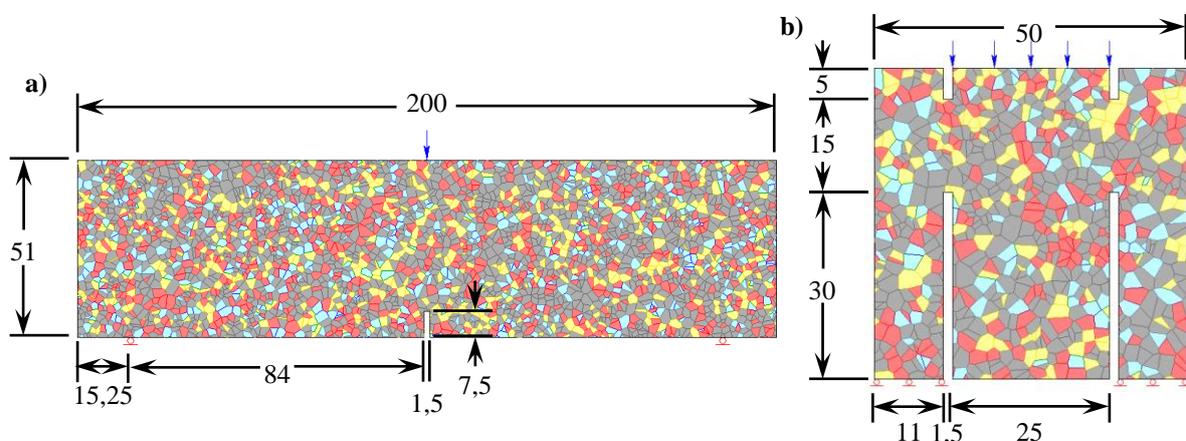


Figura 9.6. Modelos dos ensaios a) 3PB e b) PTS usados na determinação da tenacidade de fratura nos Modos I e II, respectivamente. Dimensões apresentadas em milímetros.

A Figura 9.7 apresenta algumas das etapas registradas durante o carregamento do modelo 3PB, permitindo observar o processo de propagação das fraturas desde o entalhe até o face superior do corpo de prova. A tenacidade de fratura no Modo I (K_{IC}) foi calculada a partir da equação (An *et al.*, 2021):

$$K_{IC} = \frac{P_{m\acute{a}x} L \sqrt{a}}{BW^2} \left[2,9 - 4,6 \left(\frac{a}{W} \right) + 21,8 \left(\frac{a}{W} \right)^2 - 37,6 \left(\frac{a}{W} \right)^3 + 38,7 \left(\frac{a}{W} \right)^4 \right] \quad (9.1)$$

sendo $P_{m\acute{a}x}$ a carga maxima atingida, a o comprimento do entalhe, L a distancia entre os apoios da base, B a espessura do corpo de prova e W a sua altura. Uma vez feitas as substituicoes adequadas, o valor de K_{IC} obtido para o modelo foi de 4,63 MPa√m, superando num 22% o valor medio experimental mencionado.

Por fim, os resultados das simulacoes para o ensaio PTS nao confinado sao exibidos na Figura 9.8, revelando a similaridade entre o processo de fraturamento descrito por Backers & Stephansson (2015) e o acontecido na modelagem numerica. Mesmo no estado de deformacao plana, o CVBM heterogeneo consegue representar a geracao das *wing cracks* nas primeiras etapas do carregamento, assim como o desenvolvimento das fraturas principais nos estagios proximos a condicao de pico. Neste caso, nao foi possivel calcular a tenacidade de fratura para o Modo II (K_{IIC}) devido a que as equacoes consultadas na literatura consideram apenas o estado de tensoes axissimetrico.

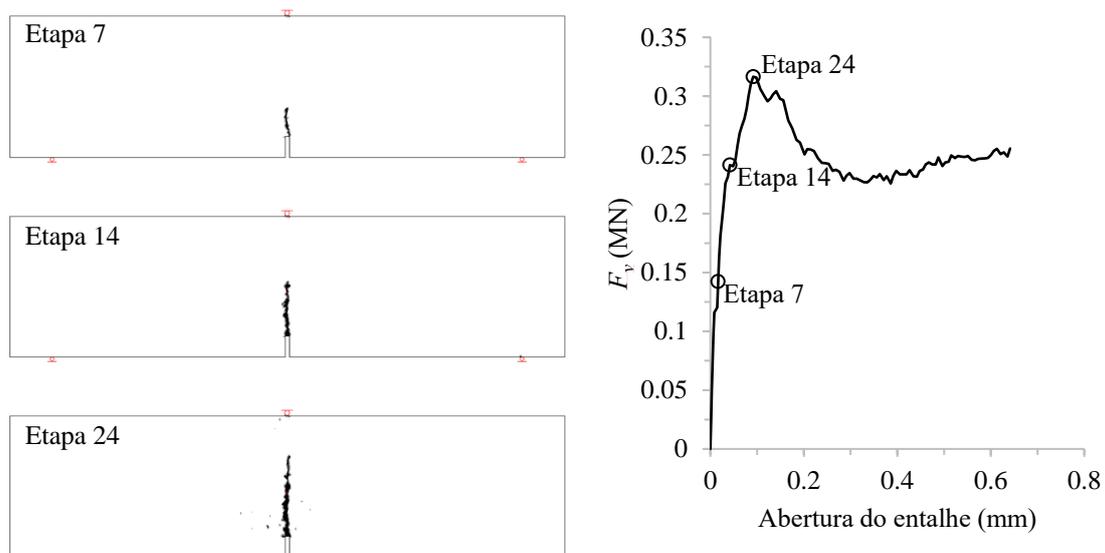


Figura 9.7. Processo de propagacao de fraturas para o modelo do ensaio 3PB.

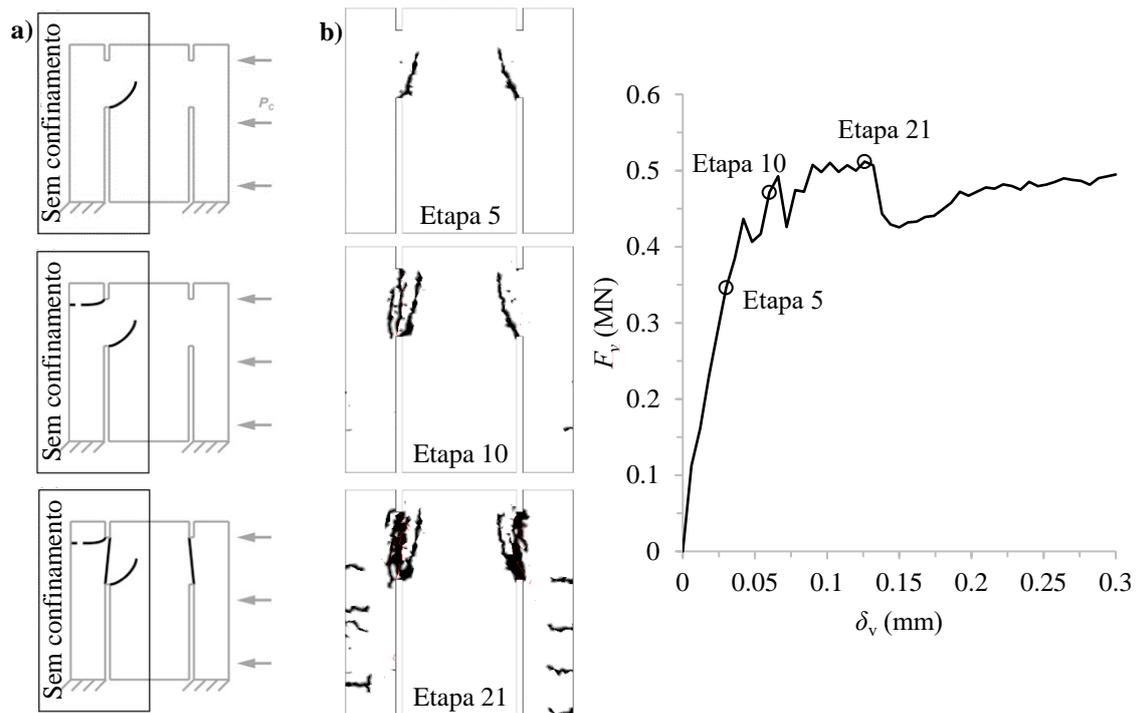


Figura 9.8. a) Processo de fraturamento acontecido durante o ensaio PTS com e sem confinamento. Modificado de Backers & Stephansson (2015). b) Resultado do modelo sem confinamento empregando o CVBM heterogêneo.

9.3. ANÁLISE DE ROCHAS ANISOTRÓPICAS E AMIGDALOIDES

Como foi mencionado na Seção 2.2, a presença de microfraturas, vazios, orientações mineralógicas ou inclusões, podem afetar consideravelmente o processo de fraturamento e a resistência das rochas.

Desde o ponto de vista mecânico, as inclusões por exemplo, provocam uma concentração de tensões nos seus arredores, desviando grande parte da tensão aplicada para o material mais competente e favorecendo o desenvolvimento de tensões de tração que derivam na aparição prematura de fraturas.

Por outro lado, a direção preferencial dos minerais e, portanto das interfaces entre partículas, induzem o comportamento anisotrópico da rocha, obtendo uma variação das propriedades mecânicas com ângulo de aplicação do carregamento. Na continuação, são apresentadas algumas análises feitas empregando o CVBM heterogêneo para estas duas condições particulares.

Para o caso das rochas foliadas foram criados os corpos de prova seguindo o procedimento adotado por Ghazvinian *et al.* (2014) e apresentado na Figura 9.9-a. No primeiro passo foi gerado um modelo com dimensões maiores às requeridas, aplicando o processo proposto neste trabalho para a atribuição pseudoaleatória dos materiais. A seguir, foi realizado o escalado da figura conforme o valor assumido de h/d , sendo h o comprimento médio dos minerais e d a sua largura média, a fim de representar a configuração interna da rocha simulada.

No terceiro passo, foi aplicada a rotação do modelo de acordo com a orientação de foliação respeito à direção de carregamento, finalizando com a extração do corpo de prova conforme as dimensões desejadas para a análise. O valor de h/d pode ser ajustado para representar diferentes níveis de deformação dos minerais, como observado na Figura 9.9-b.

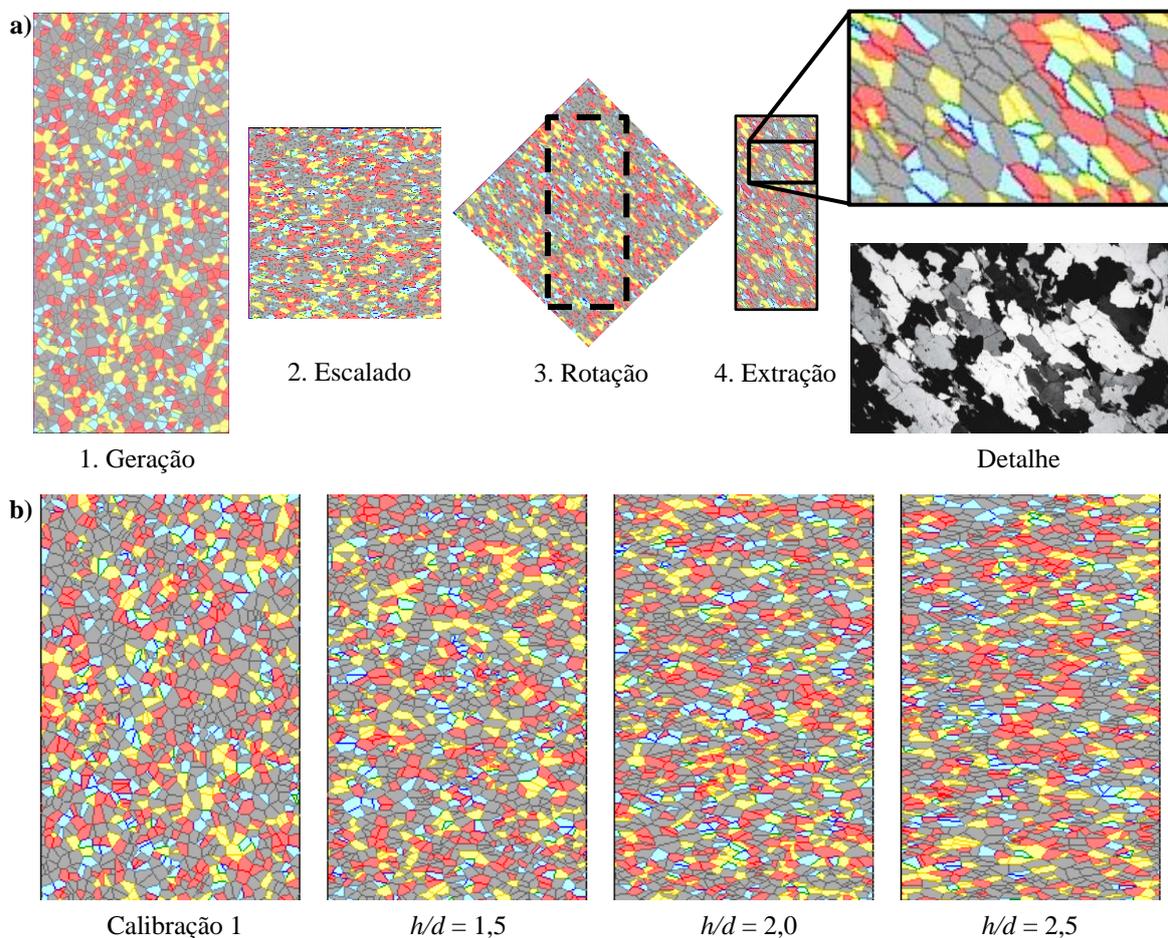


Figura 9.9. a) Processo de criação do modelo foliado e detalhe da estrutura dos blocos deformados comparados com a fotografia de uma rocha real apresentada por Passchier & Trouw (2005). b) Amostras geradas considerando diferentes valores de h/d comparadas com a configuração usada na Calibração 1.

A Figura 9.10 mostra alguns exemplos de amostras geradas com uma relação $h/d = 1,5$ e diferentes ângulos de inclinação β do plano de foliação com relação à direção horizontal. Nesta figura também são exibidos os diagramas de roseta das juntas para os diferentes casos avaliados, evidenciando a representação da sua orientação preferencial quando aplicado o procedimento descrito. Além disso, corrobora-se a disposição aleatória das juntas para o corpo de prova gerado na Calibração 1, mostrando uma porcentagem similar de elementos orientados em todas as direções.

As amostras foliadas foram submetidas a carregamento uniaxial utilizando as propriedades encontradas na Calibração 1, ajustando os valores de rigidez das juntas conforme a variação no tamanho médio das partículas, como sugerido no Capítulo 5. O modo de falha acontecido em cada uma das amostras é apresentado na Figura 9.11.

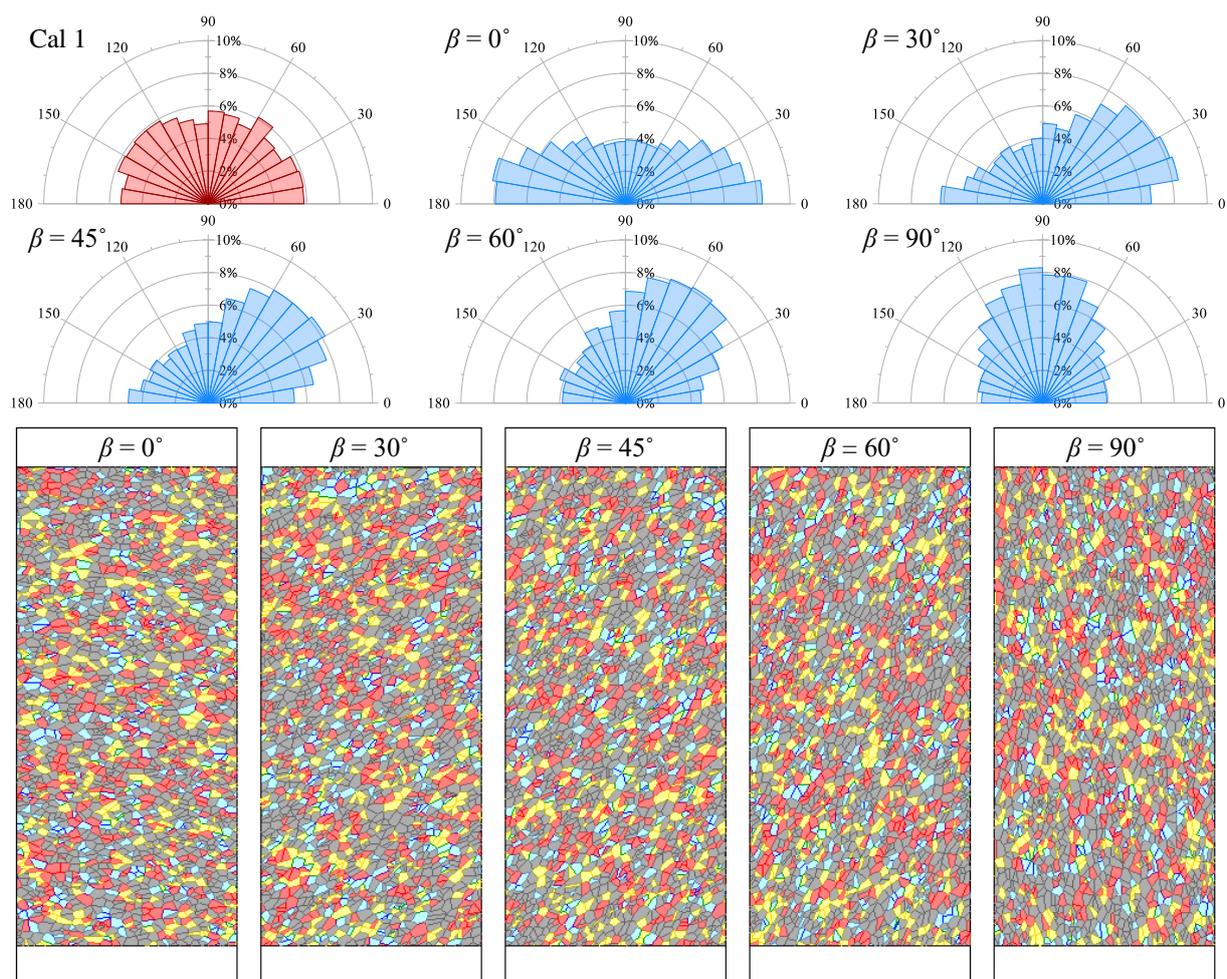


Figura 9.10. Diagramas de roseta para as direções das juntas registradas nos corpos de prova com diferentes inclinações β do plano de foliação respeito à linha horizontal ($h/d = 1,5$).

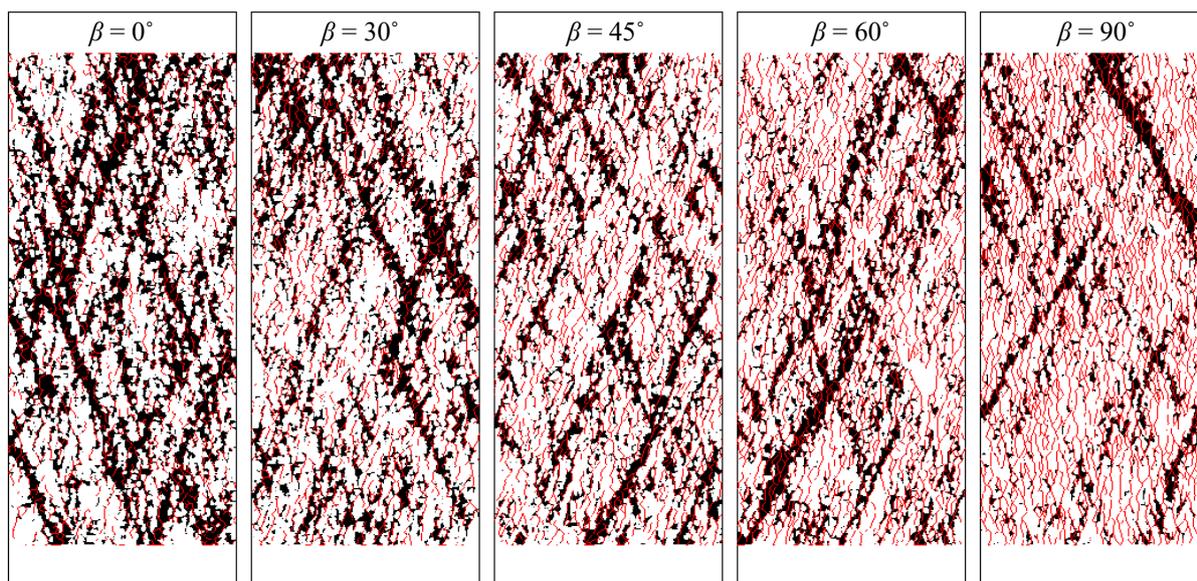


Figura 9.11. Tipo de ruptura acontecida nos corpos de prova para diferentes inclinações β do plano de foliação ($h/d = 1,5$).

Nota-se a variação do tipo de fratura dominante à medida que aumenta o ângulo de foliação, mostrando uma maior plastificação dos elementos internos quando o valor de β é baixo e a prevalência das juntas rompidas para uma inclinação próxima à direção de carregamento. Estes resultados coincidem com o tipo de falha observado por Hakala *et al.* (2007) e Ghazvinian *et al.* (2013, 2015) para vários tipos de rochas ensaiadas. A variação das propriedades macroscópicas do material com relação ao ângulo β é apresentada na Figura 9.12, mostrando capacidade do modelo para capturar o comportamento anisotrópico provocado pela direção preferencial dos minerais.

Por outro lado, como exemplo de rocha que apresenta inclusões na sua estrutura, foi considerado o basalto amigdalóide encontrado no local de implantação da hidrelétrica de Baihetan, na China. Este tipo de material apresenta uma textura criptocristalina com presença de amígdalas de clorita de tamanhos variáveis entre 0,6 e 4 mm, na porcentagem de 20 até 25% do conteúdo mineralógico da rocha (Figura 9.13-a, b).

Na Figura 9.13 é apresentado um corpo de prova logo de ser submetido ao ensaio de compressão simples, identificando os tipos de fraturas desenvolvidas e sua relação com a localização das amígdalas caracterizadas. A imagem também mostra o resultado do modelo tipo FDEM gerado por C. Zhang *et al.* (2020) para representar este tipo de rocha exibindo um tipo de ruptura similar ao acontecido experimentalmente.

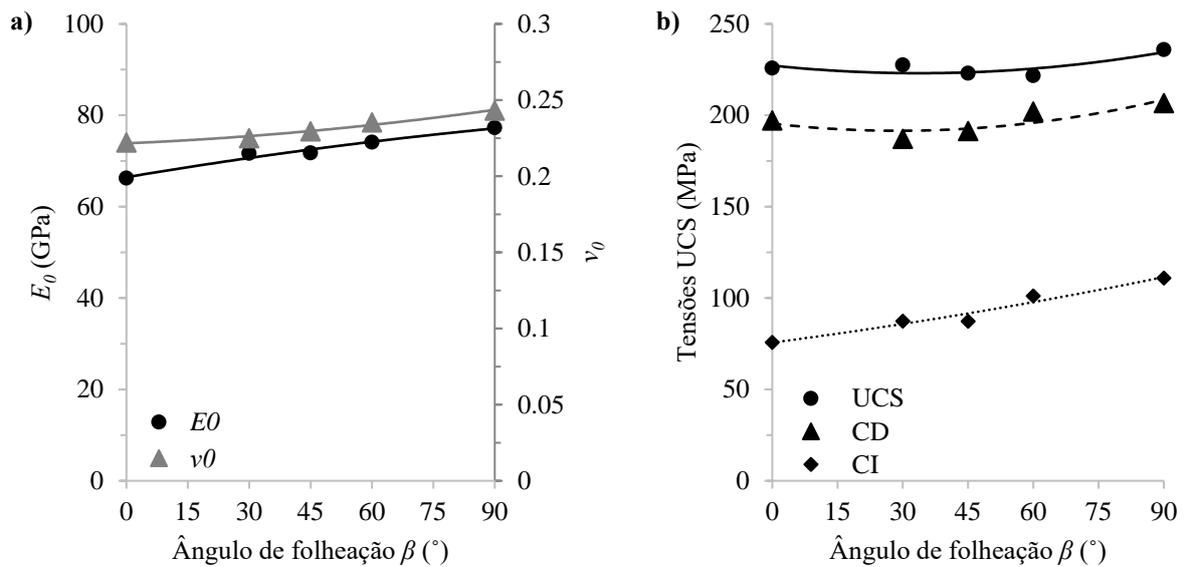


Figura 9.12. Influência da inclinação β do plano de foliação nas propriedades macroscópicas simuladas ($h/d = 1,5$).

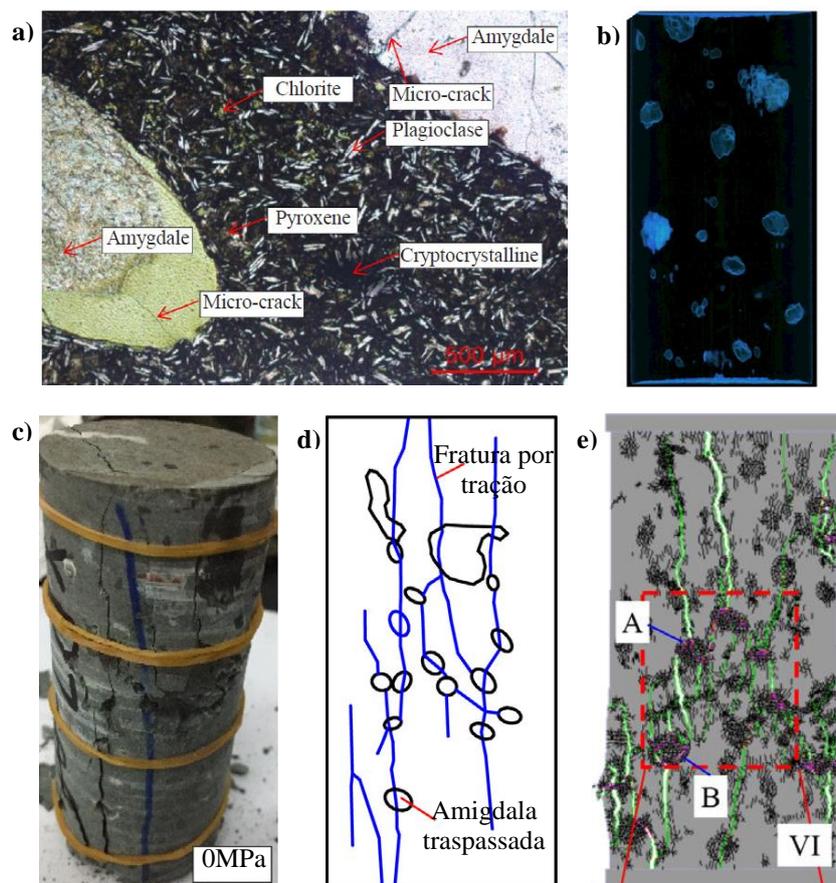


Figura 9.13. a) Microscopia de lâmina delgada e b) tomografia computadorizada do basalto amigdalóide. c) e d) Resultado do ensaio de compressão simples efetuado sobre uma das amostras de rocha. e) Resultado do modelo FDEM. Adaptado de C. Zhang *et al.*, (2020).

Para simular o comportamento do basalto amigdalóide empregando o CVBM heterogêneo, foi criado um corpo de prova seguindo o procedimento descrito a continuação:

- Na primeira etapa foi gerada a geometria da amostra com as dimensões de 55 x 120 mm, aplicando uma rede de juntas Voronoi com comprimento médio de 3 mm.
- Seguidamente, foram atribuídos dois tipos de materiais de forma pseudoaleatória nas proporções 15-85 para as amígdalas e a matriz da rocha, gerando os três tipos de contatos possíveis entre os diferentes materiais considerados.
- Por fim, foram apagadas as juntas correspondentes ao contato entre elementos da matriz, gerando em seguida uma nova rede Voronoi com tamanho médio de 1 mm para este material, obtendo o corpo de prova mostrado na Figura 9.14-a.

A relação entre materiais utilizada neste modelo obedece ao conteúdo particular identificado para o corpo mostrado na Figura 9.13-b, e reportado por C. Zhang *et al.* (2020). A representação da matriz da rocha como um conjunto de blocos de menor tamanho tem como objetivo fazer uma melhor aproximação da estrutura criptocristalina apresentada nesta região, considerando um maior número de contatos e de graus de liberdade disponíveis para o desenvolvimento adequado das fraturas.

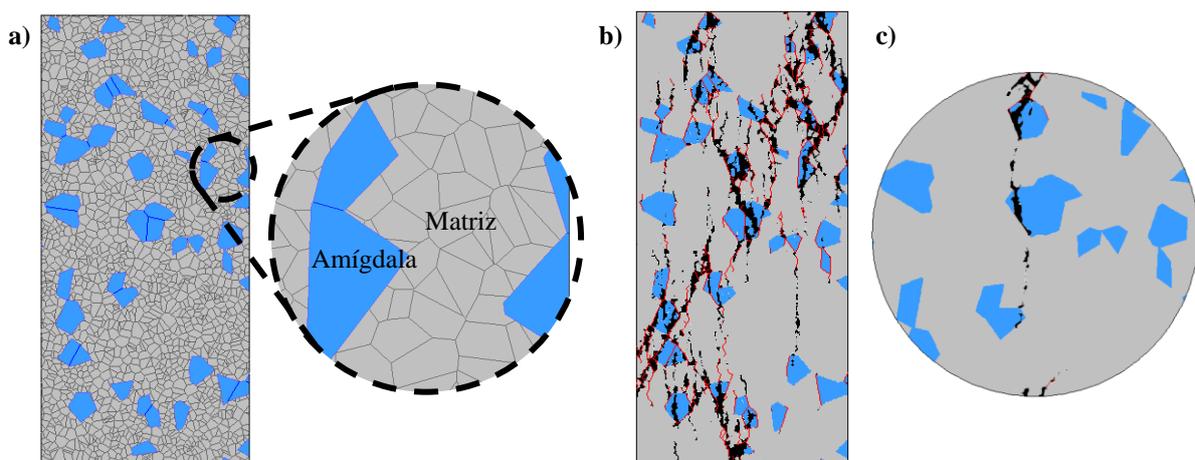


Figura 9.14. a) Corpo de prova elaborado para representar o basalto amigdalóide, detalhando os dois tipos de materiais considerados. Resultados dos modelos de b) compressão simples e c) tração indireta empregando o CVBM heterogêneo.

Igualmente, a matriz da rocha foi assumida como um material homogêneo equivalente devido ao pequeno tamanho dos cristais apresentados, entre 0,01 e 0,3 mm, e à dificuldade na identificação dos diferentes tipos de minerais constituintes.

Por outro lado, o corpo de prova usado no modelo de tração indireta foi retirado da seção central da amostra gerada anteriormente, preservando as características descritas para os blocos Voronoi e o conteúdo de cada material incorporado. Assim, depois de algumas tentativas de calibração, obteve-se os modos de ruptura apresentados na Figura 9.14, resultando num fraturamento similar ao reportado no ensaio de laboratório e no modelo FDEM.

Nota-se o desenvolvimento das fraturas numa trajetória que conecta várias das amígdalas representadas, seguindo as interfaces entre os dois tipos de materiais ou diretamente atravessando os blocos de maior tamanho. O modo de falha acontecido no modelo de compressão simples pode ser catalogado como *axial splitting*, evidenciando a geração de fraturas por tração na direção de aplicação da carga.

Por outro lado, a ruptura da amostra submetida a tração indireta acontece nas proximidades dos contatos entre os dois materiais, envolvendo principalmente a plastificação dos elementos internos numa única fratura principal. Os parâmetros utilizados nesta representação foram resumidos na Tabela 9.1.

Tabela 9.1. Parâmetros usados na modelagem do basalto amigdalóide.

		Parâmetro	Amígdala (A)	Matriz (M)				
		Parâmetro	A-A	M-M	A-M			
Blocos Voronoi	E_v (GPa)		33,8	47,4	k_n (MPa/m)	4,51E+07	9,67E+07	8,89E+07
	ν_v		0,324	0,144	k_n/k_s	1	1	1
	c_v (MPa)		64	80	c_j (MPa)	32	64	32
	ϕ_v (°)		40,6	40,6	ϕ_j (°)	40,6	40,6	40,6
	T_v (MPa)		19,2	38,4	Juntas T_j (MPa)	37,3 ^a	74,7 ^a	37,3 ^a
	c_{rv} (MPa)		0	0	c_{rj} (MPa)	0	0	0
	ϕ_{rv} (°)		32,5	32,5	ϕ_{rj} (°)	32,5	32,5	32,5
	T_{rv} (MPa)		0	0	T_{rj} (MPa)	0	0	0
	ψ_v (°)		0	0	α	4	4	4

^aDepende de outros parâmetros

9.4. ABORDAGEM PROBABILÍSTICA DA HETEROGENEIDADE INTERNA

Dadas as dificuldades na determinação das propriedades específicas para cada um dos tipos de minerais que compõem as rochas, nesta seção é apresentada uma adaptação do método

desenvolvido no Capítulo 3 para considerar a abordagem probabilística na definição da heterogeneidade material é de contatos.

A definição das propriedades dos blocos e juntas seguindo distribuições de probabilidade permite induzir um comportamento interno similar ao apresentado quando utilizada a abordagem percentual, podendo ser empregados os parâmetros macroscópicos da rocha como valores de referência. Esta forma de aproximação pode ser útil na representação do comportamento destes materiais em escalas maiores, onde a variabilidade das propriedades macroscópicas é de grande importância.

Para a aplicação da abordagem probabilística na definição da heterogeneidade do material, também foi desenvolvido um *script* em Python similar ao apresentado na Seção 3.3 (Anexo C). Inicialmente é necessário criar o modelo no formato “.fea” com a geometria e a rede de juntas Voronoi desagrupada. Além disso, deve ser gerado um arquivo no formato “.txt” com os dados de valor médio para cada propriedade listada na Tabela 3.1, junto com os parâmetros da distribuição correspondente.

Na Tabela 9.2 são exibidas as distribuições de probabilidade permitidas pelo código e os parâmetros usados para a sua definição. Adicionalmente, pode ser inserido um valor mínimo de truncamento, procurando restringir a geração de quantidades negativas ou muito pequenas. Assim mesmo, as distribuições estão limitadas à produção de valores dentro da faixa de ± 4 vezes o desvio padrão, nos casos em que seja aplicável.

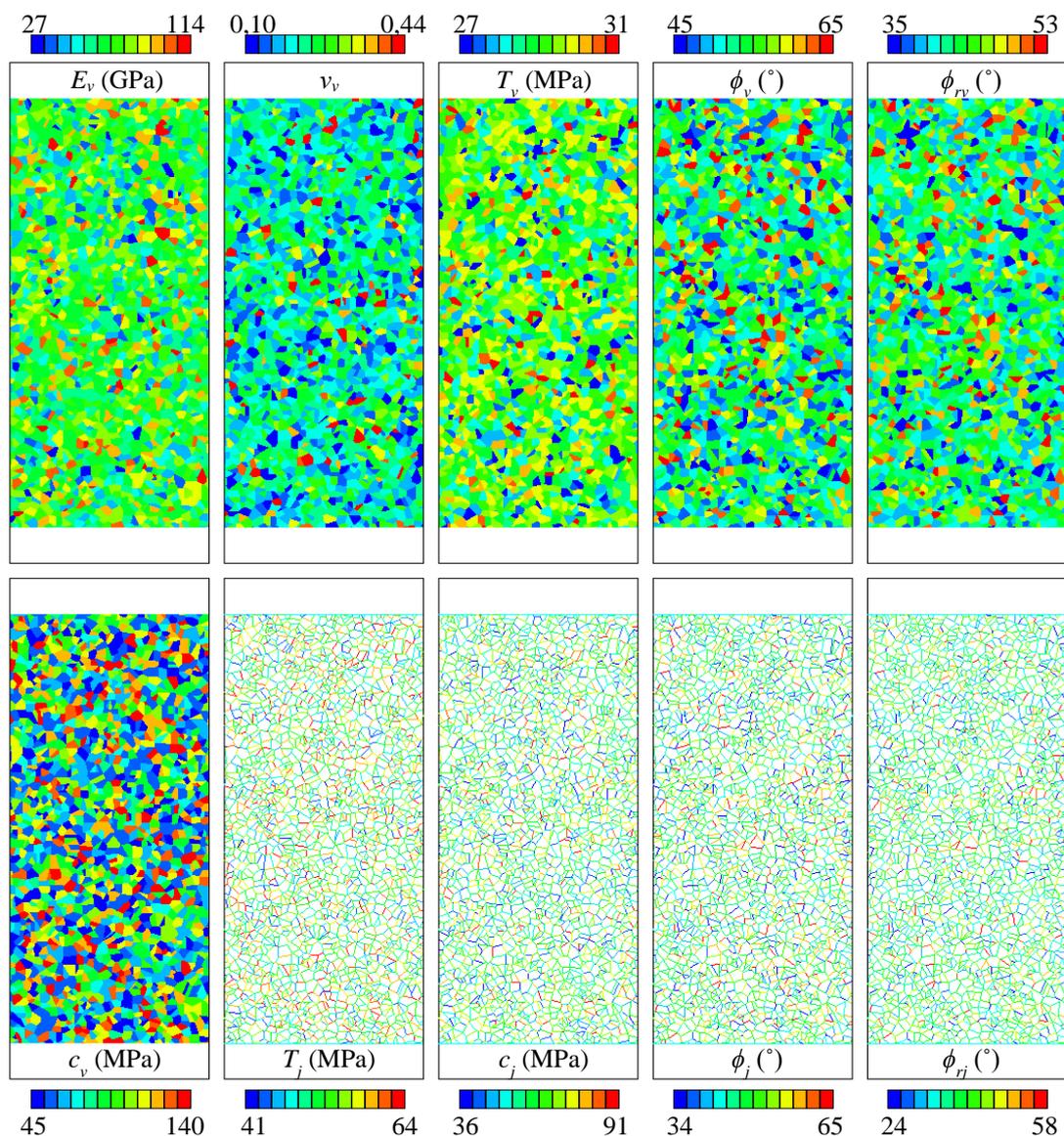
Ao longo da sequência da programação, são criados diferentes tipos de materiais para os elementos que compõem o modelo, cada um deles com um conjunto de propriedades definidas seguindo as distribuições indicadas.

Tabela 9.2. Distribuições que podem ser utilizadas na abordagem probabilística do modelo.

Distribuição	Valor médio	Valor de truncamento	Parâmetro 1	Parâmetro 2
Constante	✓			
Normal	✓	✓	Coefficiente de variação	
Lognormal *	✓	✓	Coefficiente de variação	
Weibull	✓	✓	Parâmetro de escala λ	Parâmetro de forma K
Uniforme **	✓	✓	Valor mínimo	
Triangular	✓	✓	Valor mínimo	Valor máximo

* Usar os valores dos parâmetros da distribuição Normal equivalente

** Valor máximo calculado como (2 vezes Valor médio-Valor mínimo)



Elemento	Propriedade	Valor médio	Distribuição	Truncamento	Parâmetro 1	Parâmetro 2
Voronoi	E_v (GPa)	73,6	Normal	0	0,2	-
	ν_v	0,22	Lognormal	0	0,3	-
	c_v (MPa)	93	Uniforme	0	45	-
	ϕ_v (°)	49	Triangular	0	45	65
	T_v (MPa)	29,5	Weibull	0	3,5	5
	c_{rv} (MPa)	0	Constante	-	-	-
	ϕ_{rv} (°)	0,8	Triangular	0	0,75	0,85
	T_{rv} (MPa)	0	Constante	-	-	-
	ψ (°)	0	Constante	-	-	-
	Junta	c_j (MPa)	62	Normal	0	0,2
ϕ_j (°)		49	Lognormal	0	0,15	-
T_j (MPa)		54	Normal	0	0,1	-
c_{rj} (MPa)		0	Constante	-	-	-
ϕ_{rj} (°)		0,8	Uniforme	0	0,7	-
T_{rj} (MPa)		0	Constante	-	-	-

Figura 9.15. Exemplo de amostra elaborada aplicando a abordagem probabilística na definição das propriedades dos blocos e juntas.

Na atualidade, o *software* RS2 permite a utilização de apenas 100 tipos de materiais diferentes, tanto para os blocos quanto para as juntas, de forma que o código foi desenvolvido para atribuir cada material a um grupo de elementos escolhidos aleatoriamente.

Um exemplo da aplicação do código mencionado pode-se observar na Figura 9.15, mostrando a variabilidade de cada parâmetro dentro do mesmo corpo de prova conforme as distribuições e valores médios considerados.

O código desenvolvido nesta seção permite assumir a variabilidade de todas as propriedades necessárias para estabelecer o comportamento dos elementos que integram o CVBM heterogêneo, porém, são necessárias análises de sensibilidade que permitam estabelecer a influência e importância de cada um dos parâmetros no comportamento geral do modelo.

9.5. CONCLUSÕES PARCIAIS

Ao longo do capítulo foram vistas as capacidades do CVBM heterogêneo para representar o comportamento de vários tipos de rochas que exibem diversas características na sua estrutura interna. Os estudos de materiais que apresentam inclusões ou planos de foliação mostram-se viáveis empregando o modelo implementado.

Igualmente, os resultados indicam a reprodução da resposta das rochas em condições de carregamentos especiais, como os ensaios de compressão cíclicos ou de tenacidade de fratura, permitindo analisar, desde o ponto de vista numérico, os diferentes eventos ocorridos internamente que levam à degradação e ruptura do material.

Os estudos preliminares estabelecem o potencial do modelo para ser utilizado em outros campos de atuação, onde seja interessante a representação da estrutura interna do material, como por exemplo nas análises que envolvem pavimentos ou concretos.

Porém, deve ser avaliada a possibilidade de uma definição mais precisa da própria estrutura interna das rochas, especialmente aquelas que apresentam algum tipo de alteração, devido à influência das características de alguns dos minerais sobre a resposta global do material. A presença de, por exemplo, minerais com estrutura lamelar, de baixa resistência ou com uma disposição preferencial podem funcionar como pontos de nucleação e propagação de fraturas, afetando a resistência global da rocha e mostrando um efeito maior sobre a representação numérica da anisotropia do material.

10. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

Nesta pesquisa foi apresentado um método para considerar a heterogeneidade material e de contatos no Modelo Contínuo de Blocos Voronoi (CVBM) implementado no programa RS2. O *script* desenvolvido na linguagem Python permitiu adicionar novas características ao CVBM, conseguindo uma melhor aproximação aos Modelos Baseados em Partículas usados recentemente para o estudo do comportamento das rochas. Como exemplo de aplicação, foi simulada a resposta do Diorito Äspö quando submetido a diferentes tipos de ensaios de laboratório, obtendo durante o procedimento de análise as seguintes conclusões principais:

- O CVBM heterogêneo conseguiu representar o comportamento da rocha quando consideradas as condições de compressão simples e tração indireta, atingindo o critério de aceitabilidade imposto sobre as propriedades macroscópicas emergentes.
- Durante a modelagem dos ensaios, foi possível acompanhar o desenvolvimento dos diferentes tipos de fratura, mostrando um processo de ruptura congruente com observações experimentais realizadas para o tipo de material simulado.
- O modelo conseguiu aproximar a resposta particular e geral da rocha, capturando a variabilidade natural dos resultados quando aplicada a mudança da estrutura interna do corpo de prova.
- Durante o processo de calibração, foi possível analisar o impacto de cada um dos parâmetros sobre a deformabilidade, as tensões características e a resistência do material, identificando aquelas variáveis mais relevantes para o ajuste satisfatório do modelo.
- As novas fontes de heterogeneidade interna que foram integradas permitiram um desenvolvimento mais rápido das tensões de tração ao interior do corpo de prova, provocando a geração gradual dos diferentes tipos de fratura e impactando nas tensões características (CI e CD) e no comprimento da zona de crescimento instável das fraturas.
- Verificou-se a dependência do modelo com relação à densidade da malha de elementos finitos e ao tamanho dos blocos Voronoi, conseguindo para este último caso, a redução da

influência sobre os parâmetros macroscópicos quando aplicada a correção de escala nas rigidezes dos elementos de junta.

- Empregando os modelos biaxiais foi possível representar as tensões máximas da rocha para as diferentes condições de confinamento reajustando a calibração obtida inicialmente, porém, a evolução do modo de ruptura não foi compatível com o processo reportado para diferentes tipos de rochas.

Por outro lado, algumas das considerações relacionadas com o CVBM heterogêneo são:

- O processo de fraturamento obtido durante as simulações pode estar influenciado pela incapacidade do modelo de identificar novas interações entre elementos, impactando no procedimento de calibração dos parâmetros e finalmente no comportamento global registrado.
- O algoritmo integrado no *software* RS2 para a geração da rede de juntas Voronoi mostra-se limitado na representação da estrutura interna das rochas, conseguindo reproduzir apenas distribuições granulométricas relativamente uniformes. Como foi visto no caso do basalto amigdalóide, a presença de partículas de diferentes tamanhos serve como fonte de nucleação das fraturas, influenciando no tipo de ruptura e na resistência do material simulado.
- Dada a grande quantidade de parâmetros que devem ser ajustados no CVBM heterogêneo, existe a possibilidade de encontrar múltiplas soluções de calibração para a modelagem do comportamento de um mesmo tipo de rocha, podendo estar influenciadas também pelas hipóteses adotadas no início do procedimento de ajuste.
- Destaca-se a necessidade de incluir no procedimento de calibração, o ajuste da representação na condição de compressão confinada, a fim de retratar adequadamente as tensões características e o tipo de falha para os diferentes tipos de carregamentos aplicados.

Adicionalmente, foram verificadas as capacidades do modelo para representar o comportamento de rochas que exibem diversas características na sua estrutura interna, ou aquelas submetidas a condições especiais de carregamento, servindo de base para o desenvolvimento de futuras pesquisas como:

- O estudo de problemas de grande porte considerando a heterogeneidade do meio, podendo aplicar técnicas de escalado durante a representação do material ou inclusive aproveitar a abordagem probabilística para simular o maciço rochoso.
- A análise do comportamento de rochas que apresentam planos de foliação, inclusões, vazios, microfraturas e outros defeitos na sua estrutura interna, levando em consideração o conteúdo mineralógico do material.
- A representação dos ensaios de tenacidade de fratura, podendo servir de retroalimentação no ajuste dos parâmetros do modelo e favorecendo o entendimento sobre o processo de fraturamento das rochas.
- A avaliação de problemas que envolvem carregamento cíclico, incluídos aqueles relacionados a outras áreas da engenharia civil, como por exemplo as estruturas e os pavimentos.

Contudo, aprimoramentos do método na representação das rochas também são necessários, somando novas propostas de pesquisas como:

- Integração e avaliação de novas técnicas de criação dos blocos, procurando uma representação mais precisa da estrutura interna e da granulometria dos minerais.
- Desenvolvimento do método no ambiente tridimensional, permitindo simular as condições de carregamento reais às que são submetidas as rochas em campo e laboratório.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abdelaziz, A., Zhao, Q., & Grasselli, G. (2018). Grain based modelling of rocks using the combined finite-discrete element method. *Computers and Geotechnics*, *103*, 73–81. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2018.07.003>
- An, H., Song, Y., & Liu, H. (2021). FDEM modelling of rock fracture process during three-point bending test under quasistatic and dynamic loading conditions. *Shock and Vibration*, *2021*, 21. <https://doi.org/10.1155/2021/5566992>
- Andersson, J. C. (2007). *Äspö Pillar Stability Experiment: Rock mass response to coupled mechanical thermal loading*. Royal Institute of Technology.
- Asahina, D., Aoyagi, K., Kim, K., Birkholzer, J. T., & Bolander, J. E. (2017). Elastically-homogeneous lattice models of damage in geomaterials. *Computers and Geotechnics*, *81*, 195–206. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.08.015>
- ASTM D3967-08. (2016). *Standard Test Method for Splitting Tensile Strength of Intact Rock Core Specimens*. (n.d.). <https://doi.org/10.1520/D3967-08>
- Aubertin, M., & Simon, R. (1997). A damage initiation criterion for low porosity rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics*, *34*, 15. [https://doi.org/10.1016/S1365-1609\(97\)00145-7](https://doi.org/10.1016/S1365-1609(97)00145-7)
- Backers, T., & Stephansson, O. (2015). ISRM Suggested Method for the Determination of Mode II Fracture Toughness. In R. Ulusay (Ed.), *The ISRM Suggested Methods for Rock Characterization, Testing and Monitoring: 2007-2014* (1st ed., pp. 45–56). <https://doi.org/10.1007/978-3-319-07713-0>
- Barros de Oliveira Frascá, M. H., & Pretz Sartori, P. L. (1998). Minerais e Rochas. In A. M. dos Santos Oliveira & S. N. Alves de Brito (Eds.), *Geologia de Engenharia* (1ra ed., p. 587). São Paulo: Associação Brasileira de Geologia de Engenharia (ABGE).
- Bass, J. D. (1995). Elasticity of minerals, glasses and melts. In T. J. Ahrens (Ed.), *Mineral physics & crystallography: A handbook of physical constants* (pp. 45–63). Washington, DC: American Geophysical Union.
- Basu, A., Mishra, D. A., & Roychowdhury, K. (2013). Rock failure modes under uniaxial compression, Brazilian, and point load tests. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, *72*, 457–475. <https://doi.org/10.1007/s10064-013-0505-4>
- Batzle, M., Han, D.-H., & Hofmann, R. (2006). Rock properties. In J. R. Fanchi (Ed.), *Petroleum Engineering Handbook: General Engineering: Vol. I* (pp. 571–685). Texas: Society of Petroleum Engineers.

- Bewick, R. P., Kaiser, P. K., & Amann, F. (2019). Strength of massive to moderately jointed hard rock masses. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, *11*, 562–575. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.10.003>
- Bewick, R. P., Valley, B., & Kaiser, P. K. (2012). Effect of grain scale geometric heterogeneity on tensile stress generation in rock loaded in compression. *46th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium 2012*, 7. Chicago: American Rock Mechanics Association.
- Bieniawski, Z. T. (1967a). Mechanism of brittle fracture of rock: Part I - Theory of the fracture process. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, *4*, 395–406. [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(67\)90030-7](https://doi.org/10.1016/0148-9062(67)90030-7)
- Bieniawski, Z. T. (1967b). Mechanism of brittle fracture of rock: Part II - Experimental studies. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, *4*, 407–423. [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(67\)90031-9](https://doi.org/10.1016/0148-9062(67)90031-9)
- Bieniawski, Z. T. (1967c). Mechanism of brittle fracture of rock: Part III - Fracture in tension and under long-term loading. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, *4*, 425–430. [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(67\)90032-0](https://doi.org/10.1016/0148-9062(67)90032-0)
- Cerfontaine, B., & Collin, F. (2018). Cyclic and fatigue behaviour of rock materials: review, interpretation and research perspectives. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, *51*, 391–414. <https://doi.org/10.1007/s00603-017-1337-5>
- Chang, X., Hu, C., Zhou, W., Ma, G., & Zhang, C. (2014). A combined continuous-discontinuous approach for failure process of quasi-brittle materials. *Science China Technological Sciences*, *57*(3), 550–559. <https://doi.org/10.1007/s11431-014-5482-8>
- Chen, W., & Konietzky, H. (2014). Simulation of heterogeneity, creep, damage and lifetime for loaded brittle rocks. *Tectonophysics*, *633*, 164–175. <https://doi.org/10.1016/j.tecto.2014.06.033>
- Chung, J., Lee, H., & Kwon, S. (2019). Numerical investigation of radial strain-controlled uniaxial compression test of Äspö Diorite in Grain-Based Model. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, *52*, 3659–3674. <https://doi.org/10.1007/s00603-019-01838-0>
- Cundall, P. A., & Strack, O. D. L. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, *29*(1), 47–65.
- Eberhardt, E., Stead, D., Stimpson, B., & Read, R. S. (1998). Identifying crack initiation and propagation thresholds in brittle rock. *Canadian Geotechnical Journal*, *35*, 222–233. <https://doi.org/10.1139/cgj-35-2-222>
- Eberhardt, E., Stimpson, B., & Stead, D. (1999). The influence of mineralogy on the initiation

- of microfractures in granite. *9th ISRM Congress*, 1007–1010. Paris: A.A. Balkema. Elsevier. (2023). Scopus. Retrieved August 6, 2023, from www.scopus.com
- Fabjan, T., Ivars, D. M., & Vukadin, V. (2015). Numerical simulation of intact rock behaviour via the continuum and Voronoi tessellation models: A sensitivity analysis. *Acta Geotechnica Slovenica*, *12*(2), 5–23. Retrieved from <http://www.fg.uni-mb.si/journal-ags/2015-2/article-1.asp>
- Farahmand, K., & Diederichs, M. S. (2015). Implementation of a cohesive crack model in grain-based DEM technique for simulating fracture in quasi-brittle geomaterial. *68e Conférence Canadienne de Géotechnique et 7e Conférence Canadienne Sur Le Pergélisol*, 8. Québec, Canada.
- Feng, F., Chen, S., Li, D., Hu, S., Huang, W., & Li, B. (2019). Analysis of fractures of a hard rock specimen via unloading of central hole with different sectional shapes. *Energy Science and Engineering*, *7*, 2265–2286. <https://doi.org/10.1002/ese3.432>
- Gao, F., Stead, D., & Elmo, D. (2016). Numerical simulation of microstructure of brittle rock using a grain-breakable distinct element grain-based model. *Computers and Geotechnics*, *78*, 203–217. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.05.019>
- Ghazvinian, E. (2010). *Modelling and Testing Strategies for Brittle Fracture Simulation in Crystalline Rock Samples*. Queen's University.
- Ghazvinian, E., Diederichs, M. S., Labrie, D., & Martin, C. D. (2015). An investigation on the fabric type dependency of the crack damage thresholds in brittle rocks. *Geotechnical and Geological Engineering*, *33*, 1409–1429. <https://doi.org/10.1007/s10706-015-9909-1>
- Ghazvinian, E., Diederichs, M. S., & Quey, R. (2014). 3D random Voronoi grain-based models for simulation of brittle rock damage and fabric-guided micro-fracturing. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, *6*, 506–521. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2014.09.001>
- Ghazvinian, E., Perras, M., Diederichs, M., & Labrie, D. (2013). The effect of anisotropy on crack damage thresholds in brittle rocks. *47th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium*, 10. San Francisco: American Rock Mechanics Association.
- Goodman, R. E., Taylor, R., & Brekke, T. (1968). A model for the mechanics of jointed rock. *Journal of the Soil Mechanics and Foundations Division*, *94*(3), 637–659. <https://doi.org/https://doi.org/10.1061/JSFEAQ.0001133>
- González de Vallejo, L. I., Ferrer, M., Ortuño, L., & Oteo, C. (2002). *Ingeniería Geológica* (1ra ed.). Madrid: Pearson Education S.A.
- Gulizzi, V., Rycroft, C. H., & Benedetti, I. (2018). Modelling intergranular and transgranular

- micro-cracking in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 329, 168–194. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.10.005>
- Hakala, M., Kuula, H., & Hudson, J. A. (2007). Estimating the transversely isotropic elastic intact rock properties for in situ stress measurement data reduction: A case study of the Olkiluoto mica gneiss, Finland. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 44, 14–46. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2006.04.003>
- Hamediazad, F., & Bahrani, N. (2021). Numerical simulation of hard rock pillars under compressive and shear loading conditions. *GeoNiagara*, 8. Niagara Falls.
- Hamediazad, F., & Bahrani, N. (2022). Simulation of hard rock pillar failure using 2D continuum-based Voronoi tessellated models: The case of Quirke Mine, Canada. *Computers and Geotechnics*, 148, 17. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2022.104808>
- He, C., Okubo, S., & Nishimatsu, Y. (1990). Study on the class II behavior of rock. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 23, 261–273.
- Hoek, E., & Martin, C. D. (2014). Fracture initiation and propagation in intact rock - A review. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 6, 287–300.
- Inga, C. E. C., Sinha, S., Walton, G., & Holley, E. (2023). Modeling brazilian tensile strength tests on a brittle rock using deterministic, semi-deterministic, and voronoi bonded block models. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 56, 5293–5313. <https://doi.org/10.1007/s00603-023-03329-9>
- Lampinen, H. (2006). Äspö Pillar Stability Experiment: Detailed geological mapping of the pillar blocks. In *SKB Rep. IPR-05-24*. Stockholm.
- Lan, H., Martin, C. D., & Hu, B. (2010). Effect of heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behavior during compression loading. *Journal of Geophysical Research. Solid Earth*, 115, 14. <https://doi.org/10.1029/2009jb006496>
- Li, D., & Wong, L. N. Y. (2013). The brazilian disc test for rock mechanics applications: Review and new insights. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 46, 269–287. <https://doi.org/10.1007/s00603-012-0257-7>
- Li, D., Zhao, J., & Ma, J. (2022). Experimental studies on rock thin-section image classification by deep learning-based approaches. *Mathematics*, 10(13), 28. <https://doi.org/10.3390/math10132317>
- Li, H., Ma, H., Shi, X., Zhou, J., Zhang, H., & Daemen, J. J. K. (2020). A 3D Grain-Based Model for Simulating the Micromechanical Behavior of Salt Rock. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 53, 2819–2837. <https://doi.org/10.1007/s00603-020-02085-4>
- Li, X. F., Li, H. B., Liu, L. W., Liu, Y. Q., Ju, M. H., & Zhao, J. (2020). Investigating the crack

- initiation and propagation mechanism in brittle rocks using grain-based finite-discrete element method. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 127, 20. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2020.104219>
- Li, Y., & Bahrani, N. (2020). A numerical study on the failure process and strength of heterogeneous rocks and highly interlocked jointed pillars. *54th U.S. Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*, 14. Golden: American Rock Mechanics Association.
- Li, Y., & Bahrani, N. (2021a). A continuum grain-based model for intact and granulated Wombeyan marble. *Computers and Geotechnics*, 129, 21. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2020.103872>
- Li, Y., & Bahrani, N. (2021b). Strength and failure mechanism of highly interlocked jointed pillars: Insights from upscaled continuum grain-based models of a jointed rock mass analogue. *Computers and Geotechnics*, 137, 16. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2021.104278>
- Lisjak, A., Liu, Q., Zhao, Q., Mahabadi, O. K., & Grasselli, G. (2013). Numerical simulation of acoustic emission in brittle rocks by two-dimensional finite-discrete element analysis. *Geophysical Journal International*, 195, 423–443. <https://doi.org/10.1093/gji/ggt221>
- Liu, C., Liu, X., Wu, C., Wang, E., Wang, S., & Peng, H. (2023). Investigation of multiscale failure mechanism of red bed soft rock using Grain-Based Finite-Discrete Element Method combined with X-Ray Micro-computerized Tomography. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 27(3), 1350–1367. <https://doi.org/10.1007/s12205-023-1445-6>
- Liu, Y., & Dai, F. (2021). A review of experimental and theoretical research on the deformation and failure behavior of rocks subjected to cyclic loading. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 13, 1203–1230. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2021.03.012>
- Ma, G., Zhou, W., & Chang, X.-L. (2014). Modeling the particle breakage of rockfill materials with the cohesive crack model. *Computers and Geotechnics*, 61, 132–143. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2014.05.006>
- Ma, G., Zhou, W., Chang, X.-L., & Chen, M.-X. (2016). A hybrid approach for modeling of breakable granular materials using combined finite-discrete element method. *Granular Matter*, 18, 1–17. <https://doi.org/10.1007/s10035-016-0615-3>
- Mahabadi, O. K., Randall, N. X., Zong, Z., & Grasselli, G. (2012). A novel approach for micro-scale characterization and modeling of geomaterials incorporating actual material heterogeneity. *Geophysical Research Letters*, 39, 6. <https://doi.org/10.1029/2011GL050411>

- Mahabadi, O. K., Tatone, B. S. A., & Grasselli, G. (2014). Influence of microscale heterogeneity and microstructure on the tensile behavior of crystalline rocks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, *119*, 5324–5341. <https://doi.org/10.1002/2014JB011064>
- Manouchehrian, A., & Cai, M. (2016). Influence of material heterogeneity on failure intensity in unstable rock failure. *Computers and Geotechnics*, *71*, 237–246. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2015.10.004>
- Martin, C. D., & Chandler, N. A. (1994). The progressive fracture of Lac du Bonnet granite. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, *31*(6), 643–659.
- Mollon, G., & Zhao, J. (2012). Fourier-Voronoi-based generation of realistic samples for discrete modelling of granular materials. *Granular Matter*, *14*, 621–638. <https://doi.org/10.1007/s10035-012-0356-x>
- Munjiza, A., Owen, D. R. J., & Bicanic, N. (1995). A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Engineering Computations*, *12*, 145–174. <https://doi.org/10.1108/026444409510799532>
- Nicksiar, M. (2013). *Effective parameters on crack initiation stress in low porosity rocks*. University of Alberta.
- Nicksiar, M., & Martin, C. D. (2012). Evaluation of methods for determining crack initiation in compression tests on low-porosity rocks. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, *45*, 607–617. <https://doi.org/10.1007/s00603-012-0221-6>
- Nicksiar, M., & Martin, C. D. (2014). Factors affecting crack initiation in low porosity crystalline rocks. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, *47*, 1165–1181. <https://doi.org/10.1007/s00603-013-0451-2>
- Nordlund, E., Li, C., & Carlsson, B. (1999). Äspö Hard Rock Laboratory: Mechanical properties of the diorite in the prototype repository at Äspö HRL - Laboratory tests. In *SKB Rep. IPR-99-25*. Stockholm.
- Pakzad, R., Wang, S., & Sloan, S. W. (2020). Three-dimensional finite element simulation of fracture propagation in rock specimens with pre-existing fissure(s) under compression and their strength analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, *44*, 1472–1494. <https://doi.org/10.1002/nag.3071>
- Park, J. W., Park, C., Song, J. W., Park, E. S., & Song, J. J. (2017). Polygonal grain-based distinct element modeling for mechanical behavior of brittle rock. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, *41*, 880–898.

- <https://doi.org/10.1002/nag.2634>
- Passchier, C. W., & Trouw, R. A. J. (2005). Microtectonics. In *Microtectonics* (2nd ed.). <https://doi.org/10.1007/3-540-29359-0>
- Peng, J., Rong, G., & Jiang, M. (2018). Variability of crack initiation and crack damage for various rock types. *Arabian Journal of Geosciences*, *11*, 10. <https://doi.org/10.1007/s12517-018-3618-z>
- Peng, J., Wong, L. N. Y., & Teh, C. I. (2017). Influence of grain size heterogeneity on strength and microcracking behavior of crystalline rocks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, *122*, 1054–1073. <https://doi.org/10.1002/2016JB013469>
- Pérez, I., Muniz de Farias, M., Castro, M., Roselló, R., Recarey Morfa, C., Medina, L., & Oñate, E. (2019). Modeling polycrystalline materials with elongated grains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, *118*, 121–131. <https://doi.org/10.1002/nme.6004>
- Perras, M. A., & Diederichs, M. S. (2014). A review of the tensile strength of rock: concepts and testing. *Geotechnical and Geological Engineering*, *32*, 525–546. <https://doi.org/10.1007/s10706-014-9732-0>
- Potyondy, D. O., & Cundall, P. A. (2004). A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, *41*, 1329–1364. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2004.09.011>
- Qiu, W., Jian, L., Cheng, Y., & Bai, H. (2021). Three-Dimensional reconstruction of tunnel face based on multiple images. *Advances in Civil Engineering*, *2021*, 11. <https://doi.org/10.1155/2021/8837309>
- Quan, J., Rong, G., Xu, L., & Chen, Z. (2023). A three-dimensional grain-based model for studying the microscopic fracture behaviour of granite. *Computers and Geotechnics*, *159*, 18. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2023.105427>
- Rasmussen, Leandro L., & de Assis, A. P. (2018). Elastically-homogeneous lattice modelling of transversely isotropic rocks. *Computers and Geotechnics*, *104*, 96–108. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2018.08.016>
- Rasmussen, Leandro L., de Farias, M. M., & de Assis, A. P. (2018). Extended Rigid Body Spring Network method for the simulation of brittle rocks. *Computers and Geotechnics*, *99*, 31–41. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2018.02.021>
- Rasmussen, Leandro Lima. (2018). *Modelos Lattice na Engenharia de Rochas*. Universidade de Brasília.
- Recarey Morfa, C., Muniz de Farias, M., Pérez Morales, I. P., Ibañez de Navarra, E. O., & Roselló Valera, R. (2018). Virtual modeling of polycrystalline structures of materials

- using particle packing algorithms and Laguerre cells. *Computational Particle Mechanics*, 5(2), 213–226. <https://doi.org/10.1007/s40571-017-0164-5>
- Rocscience Inc. (2022). *RS2 manual - Rock and Soil 2-dimensional analysis program*. Retrieved from <https://www.rocscience.com/help/rs2/documentation>
- Rógenes, E. (2021). *Modelagem de ruptura de obras subterrâneas em maciços rochosos com elevadas tensões de campo*. Universidade de Brasília.
- Rógenes, E., de Farias, M. M., & Rasmussen, L. L. (2022). The Continuum Voronoi Block Model for simulation of fracture process in hard rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 46(1), 89–112. <https://doi.org/10.1002/nag.3292>
- Rógenes, E., Gomes, A. dos S., de Farias, M. M., & Rasmussen, L. L. (2023). Pseudo-discontinuum model to simulate hard-rock mine pillars. *Underground Space*, 11, 81–95. <https://doi.org/10.1016/j.undsp.2022.12.002>
- Saksala, T. (2022). Effect of inherent microcrack populations on rock tensile fracture behaviour: numerical study based on embedded discontinuity finite elements. *Acta Geotechnica*, 17, 2079–2099. <https://doi.org/10.1007/s11440-021-01354-y>
- Sanipour, S., Bahrani, N., & Corkum, A. (2022). Simulation of Brittle Failure Around Canada's Mine-By Experiment Tunnel Using 2D Continuum-Based Voronoi Tessellated Models. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 55(10), 6387–6408. <https://doi.org/10.1007/s00603-022-02969-7>
- Sinha, S., & Walton, G. (2020a). A study on Bonded Block Model (BBM) complexity for simulation of laboratory-scale stress-strain behavior in granitic rocks. *Computers and Geotechnics*, 118, 20. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2019.103363>
- Sinha, S., & Walton, G. (2020b). Simulating laboratory-scale damage in granite using bonded block models (BBM). In S. A. B. Fontoura, R. Rocca, & J. Mendoza (Eds.), *Rock Mechanics for Natural Resources and Infrastructure Development* (pp. 2461–2468). Foz do Iguaçu, Brasil: ISRM.
- Spreafico, M. C., Cervi, F., Francioni, M., Stead, D., & Borgatti, L. (2017). An investigation into the development of toppling at the edge of fractured rock plateaux using a numerical modelling approach. *Geomorphology*, 288, 83–98. <https://doi.org/10.1016/j.geomorph.2017.03.023>
- Staub, I., Andersson, J. C., Magnor, B., & Kärnbränslehantering, S. (2004). Äspö Pillar Stability Experiment: Geology and mechanical properties of the rock in TASQ. In *SKB Rep. R-04-01*. Stockholm.

- Sun, C. T., & Jin, Z.-H. (2012). *Fracture Mechanics* (1st ed.). <https://doi.org/10.1016/C2009-0-63512-1>
- Valley, B., Suorineni, F. T., & Kaiser, P. K. (2010). Numerical analyses of the effect of heterogeneities on rock failure process. *44th US Rock Mechanics Symposium - 5th US/Canada Rock Mechanics Symposium*, 10. <https://doi.org/10.13140/2.1.1622.7522>
- Walton, G. (2014). *Improving continuum models for excavations in rock masses under high stress through an enhanced understanding of post-yield dilatancy*. Queen's University.
- Wan, W., & Li, C. C. (2022). Microscopic and acoustic interpretations of the physics of rock burst and the difference in fracturing patterns in class I and class II rocks. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 55, 6841–6862. <https://doi.org/10.1007/s00603-022-03015-2>
- Wang, X., & Cai, M. (2019). A comprehensive parametric study of grain-based models for rock failure process simulation. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 115, 60–76. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2019.01.008>
- Wawersik, W. R., & Fairhurst, C. (1970). A study of brittle rock fracture in laboratory compression experiments. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences And*, 7, 561–575. [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(70\)90007-0](https://doi.org/10.1016/0148-9062(70)90007-0)
- Wen, T., Tang, H., Ma, J., & Wang, Y. (2018). Evaluation of methods for determining crack initiation stress under compression. *Engineering Geology*, 235, 81–97. <https://doi.org/10.1016/j.enggeo.2018.01.018>
- Xiao, H., He, L., Li, X., Zhang, Q., & Li, W. (2021). Texture synthesis: A novel method for generating digital models with heterogeneous diversity of rock materials and its CGM verification. *Computers and Geotechnics*, 130, 14. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2020.103895>
- Yue, Z. Q., Chen, S., & Tham, L. G. (2003). Finite element modeling of geomaterials using digital image processing. *Computers and Geotechnics*, 30, 375–397. [https://doi.org/10.1016/S0266-352X\(03\)00015-6](https://doi.org/10.1016/S0266-352X(03)00015-6)
- Zhang, C., Liu, Z., Pan, Y., Gao, Y., Zhou, H., & Cui, G. (2020). Influence of amygdale on crack evolution and failure behavior of basalt. *Engineering Fracture Mechanics*, 226, 22. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2019.106843>
- Zhang, Yahui, & Wong, L. N. Y. (2018). A review of numerical techniques approaching microstructures of crystalline rocks. *Computers and Geosciences*, 115, 167–187. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2018.03.012>
- Zhang, Yanbo, Zhang, E., Yao, X., Liang, P., Tian, B., Sun, L., ... Wang, S. (2020). Study on the characterization of rock heterogeneity and simulation of fracture process based on the

mesoscopic structure. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 570(2), 8. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/570/2/022028>

Zhou, W., Yuan, W., Ma, G., & Chang, X. L. (2016). Combined finite-discrete element method modeling of rockslides. *Engineering Computations : International Journal for Computer-Aided Engineering and Software*, 33(5), 1530–1559. <https://doi.org/10.1108/EC-04-2015-0082>

ANEXOS

A. CÓDIGO PYTHON

A continuação, são apresentados os códigos implementados em Python para a inclusão da heterogeneidade material e de contatos no CVBM.

- Arquivo “VoronoiRS2.py”, usado para definir aleatoriamente o tipo de mineral a cada bloco Voronoi.

```
# Open files and initial info
print('ini')

import random
import math
escribir=open('Output1.txt','w')

#Model name
archivo=open('ModelFile.fea') #Modify

#Mineral content of each mineral type (in decimal)
vol=[a,b,c,...] #Modify

#Number of plates
delmax=x #Modify

#Seed for random generation
# seed1=10 #Modify
# random.seed(seed1)

#
#Data extraction from model file
a=archivo.readlines()
for line in a:
    if 'nodes: total: ' in line:
        nodini=a.index(line)
    if 'elements: total: ' in line:
        triini=a.index(line)
    if 'joints: total: ' in line:
        cohini=a.index(line)
    if ' element 0 start:' in line:
        vorini=a.index(line)
    if 'materials mesh end:' in line:
        vorfin=a.index(line)

voronoi=[]
for lineid in range(vorini,vorfin):
```

```

        voronoi.append(a[lineid])

nodos=[]
for lineid in range(nodini+1,triini-2):
    nodos.append(a[lineid])

elemtri=[]
for lineid in range(triini+1,cohini-1):
    elemtri.append(a[lineid])

#
#Data manipulation for "voronoi"
datoline=[]
mat=[]
nn=0
for line in voronoi:
    datoline.append(line)
    nn=nn+1
    if nn==8:
        mat.append(datoline)
        datoline=[]
        nn=0
nelem=len(mat)

#Data points for definition of voronoi cell
elemlim=[]
for i in mat:
    vorlim=[]
    for j in range(3):
        datotext=i[j+1].strip().split()
        del datotext[0]
        datotext[0]=datotext[0].replace(',','')
        prov=[]
        for k in datotext:
            prov.append(float(k))
        vorlim.append(prov)
    elemlim.append(vorlim)

#
#Materials random asignation based on mineral percentages by elements area

#Data manipulation for "elemtri" and "nodos"
nod=[]
for line in nodos:
    datoline=[]
    nodcoor=[]
    datotext=line.strip().split()
    del datotext[1:2]

```

```

del datotext[2:3]
for i in datotext:
    datoline.append(float(i))
for j in range(len(datoline)-1):
    nodcoor.append(datoline[j+1])
nod.append([datoline[0],nodcoor])
for i in range(len(nod)):
    nod[i][0]=int(nod[i][0])

tri=[]
for line in elemtri:
    datoline=[]
    datotext=line.strip().split()
    del datotext[1:4]
    del datotext[2:3]
    del datotext[3:5]
    datotext1=datotext[1].split(',')
    datotext1[0]=datotext1[0].replace('[','')
    datotext1[-1]=datotext1[-1].replace(']','')
    datotext2=datotext[2].split('k')
    datoline.append(int(datotext[0]))
    for i in range(len(datotext1)):
        datotext1[i]=int(datotext1[i])
    tri.append([int(datotext[0]),datotext1,int(datotext2[1])])

#Identify nodes sharing between elements
for i in range(len(nod)):
    eleuni=[]
    for j in tri:
        if nod[i][0] in j[1]:
            eleuni.append(j[0])
    nod[i].append(eleuni)
ininum=nod[0][0]

#Area of each triangular element
areatri=[]
for i in tri:
    coordi=[]
    for j in i[1]:
        coordi.append(nod[j-ininum][1])
    coordi.append(coordi[0])
    aa=0
    bb=0
    for j in range(len(coordi)-1):
        aa=aa+coordi[j][0]*coordi[j+1][1]
        bb=bb+coordi[j][1]*coordi[j+1][0]
    areatri.append((aa-bb)/2)

#Grouping triangular elements for the same voronoi

```

```

grupotri=[]
rev=[]
for i in nod:
    if i[0] in rev:
        continue
    else:
        listat=[]
        listan=[]
        listan.append(i[0])
        for j in i[2]:
            listat.append(j)
        for j in listat:
            for k in tri[j-1][1]:
                if k in listan:
                    continue
                else:
                    listan.append(k)
                    for l in nod[k-ininum][2]:
                        if l in listat:
                            continue
                        else:
                            listat.append(l)

        for j in listan:
            rev.append(j)
        if len(listat)==0:
            print('Nod without elements: '+str(i))
        else:
            grupotri.append(listat)

#Area for each voronoi cell
areavor=[]
for i in grupotri:
    areai=0
    for j in i:
        areai=areai+areatri[j-ininum]
    areavor.append(areai)

#Coordinates of all points defining each voronoi cell
grupocoor=[]
for i in grupotri:
    coordgr=[]
    for j in i:
        for k in tri[j-1][1]:
            if nod[k-ininum][1] not in coordgr:
                coordgr.append(nod[k-ininum][1])
    grupocoor.append(coordgr)

#Identify voronoi cell with the corresponding number
volid=[-1]*nelem

```

```

print(len(vorid),len(grupotri))
for i in range(nelem):
    for k in grupocoor:
        if elemлим[i][0] in k and elemлим[i][1] in k and
elemлим[i][2] in k:
            vorid[grupocoor.index(k)]=i

if -1 in vorid or len(set(vorid))!=len(vorid):
    print('Error, voronoi not identified')
    print(vorid)
    print(grupotri)

#Identify plates regions and total area of model
plateid=[]
for i in range(delmax):
    maxi=areavor.index(max(areavor))
    del areavor[maxi]
    plateid.append(vorid[maxi])
    del vorid[maxi]

#print(vorid)
areatt=0
areatt=sum(areavor)
print('Total area of model: '+str(areatt))
print(areavor)
print('Plate voronoi cell: '+str(plateid))

#Random material definition
voln=[ele*areatt for ele in vol]
print('Theoretical area for each material: '+str(voln))
volnr=[]
mats=[]
useele=list(range(nelem))
for i in plateid:
    useele.remove(i)
for i in range(len(voln)-1):
    imat=[]
    perareai=0
    while perareai<voln[i]:
        elemat=useele[random.randint(0,len(useele)-1)]
        imat.append(elemat)
        useele.remove(elemat)
        k=vorid.index(elemat)
        perareai=perareai+areavor[k]
    mats.append(imat)
    volnr.append(perareai)
mats.append(useele)
mats.append(plateid)
volnr.append(areatt-sum(volnr))
print('Real area for each material: '+str(volnr))

```

```

defmat=[]
for i in range(nelem):
    for j in mats:
        if i in j:
            defmat.append(mats.index(j))

#Areas for each material
areamat=[]
for i in range(len(mats)-1):
    iareamat=[]
    for j in mats[i]:
        iareamat.append(areavor[vorid.index(j)])
    areamat.append(iareamat)
print('Voronoi areas for each material')
print(areamat)

#
#Data output
for i in range(nelem):
    for j in range(5):
        escribir.write(mat[i][j])
    escribir.write('      stage 1: '+str(defmat[i]+1)+'\n')
    for j in range(6,8):
        escribir.write(mat[i][j])

#
#Final
escribir.write('\n'\n'\n'+Total area of model: '+str(areatt)+'\n')
escribir.write('\n'\n'\n'+Theoretical area for each material:
'+str(voln)+'\n')
escribir.write('Real area for each material: '+str(volnr)+'\n')

escribir.write('\n'\n'\n'+Area for all varonoi cells'+\n')
escribir.write(str(areavor))

escribir.write('\n'\n'\n'+Voronoi areas for each material'+\n')
escribir.write(str(areamat))
print('fin')
escribir.close()
archivo.close()

```

- Arquivo “CohesivosRS2.py”, usado para assignar o tipo de material de cada junta com base nos materiais dos blocos conectados.

```

# Open .txt files
print('ini')

import math

```

```

escribir=open('Output2.txt','w')

#Model name
archivo=open('ModelFile.fea') #Modify

#Number of diferent materials
nmat=a #Modify

#Initial segment for read info of model
bound=b #Modify for correct line identification

#
#Data extraction from model file
a=archivo.readlines()
for line in a:
    if 'nodes: total: ' in line:
        nodini=a.index(line)
    if 'elements: total: ' in line:
        triini=a.index(line)
    if 'joints: total: ' in line:
        cohini=a.index(line)
    if 'change:' in line:
        cohfin=a.index(line)
    if 'boundary '+str(bound)+' start:' in line:
        boundini=a.index(line)
    if 'v6 geometry end:' in line:
        boundfin=a.index(line)

nodos=[]
for lineid in range(nodini+1,triini-2):
    nodos.append(a[lineid])

elemtri=[]
for lineid in range(triini+1,cohini-1):
    elemtri.append(a[lineid])

elemcoh=[]
for lineid in range(cohini+1,cohfin-1):
    elemcoh.append(a[lineid])

segmentos=[]
for lineid in range(boundini,boundfin):
    segmentos.append(a[lineid])

#
#Create combination of materials bonded by cohesive elements
lista=list(range(1,nmat+1))
combina=[]

```

```

for i in lista:
    combina.append([i,i])
for i in range(len(lista)-1):
    for j in range(i+1,len(lista)):
        combina.append([[lista[i],lista[j]],[lista[j],lista[i]]])

#
#Data manipulation for "elemtri", "elemcoh", "nodos" and "segmentos"
tri=[]
for line in elemtri:
    datoline=[]
    datotext=line.strip().split()
    del datotext[1:4]
    del datotext[2:3]
    del datotext[3:5]
    datotext1=datotext[1].split(',')
    datotext1[0]=datotext1[0].replace('[','')
    datotext1[-1]=datotext1[-1].replace(']','')
    datotext2=datotext[2].split('k')
    datoline.append(int(datotext[0]))
    for i in range(len(datotext1)):
        datotext1[i]=int(datotext1[i])
    tri.append([int(datotext[0]),datotext1,int(datotext2[1])])

coh=[]
for line in elemcoh:
    datoline=[]
    datotext=line.strip().split()
    del datotext[1:4]
    del datotext[2:3]
    datotext1=datotext[1].split(',')
    datotext1[0]=datotext1[0].replace('[','')
    datotext1[-1]=datotext1[-1].replace(']','')
    datotext2=datotext[2].split('t')
    datoline.append(int(datotext[0]))
    for i in range(len(datotext1)):
        datotext1[i]=int(datotext1[i])
    coh.append([int(datotext[0]),datotext1,int(datotext2[1])])

nod=[]
for line in nodos:
    datoline=[]
    nodcoor=[]
    datotext=line.strip().split()
    del datotext[1:2]
    del datotext[2:3]
    for i in datotext:
        datoline.append(float(i))
    for j in range(len(datoline)-1):

```

```

        nodcoor.append(datoline[j+1])
        nod.append([datoline[0],nodcoor])
for i in range(len(nod)):
        nod[i][0]=int(nod[i][0])

segm=[]
nn=0
textline=[]
for line in segmentos:
        textline.append(line)
        nn=nn+1
        if nn==28:
                segm.append(textline)
                textline=[]
                nn=0
print(segm[0][0])
narchivo=len(segm)

#
#Couple points extraction for segments
angle=[]
coordline=[]
for i in segm:
        ocho=i[8].strip().split()
        ocho[1]=ocho[1].replace(',','')
        nueve=i[9].strip().split()
        nueve[1]=nueve[1].replace(',','')
        angle.append(math.atan2(float(nueve[2]) -
float(ocho[2]),float(nueve[1]) - float(ocho[1])))
        coordline.append([[float(ocho[1]),float(ocho[2])],[float(nueve[1])
,float(nueve[2])]],
                [[float(nueve[1]),float(nueve[2])],[float(ocho[1]),float(ocho[2])]]
])

#
#Identify nodes sharing between elements
for i in range(len(nod)):
        eleuni=[]
        for j in tri:
                if nod[i][0] in j[1]:
                        eleuni.append(j[0])
        nod[i].append(eleuni)
ininum=nod[0][0]

#Initial and final nods dentification for each joint element
nodext=[]
for i in range(len(coh)):
        extremos=[]

```

```

    for j in range(4):
        extremos.append(coh[i][1][j])
    nodext.append(extremos)

#Coordinates extraction for joint element points
coorext=[]
for i in nodext:
    coorext1=[]
    for j in range(len(i)):
        if nod[i[j]-ininum][1] not in coorext1:
            coorext1.append(nod[i[j]-ininum][1])
    if len(coorext1)!=2:
        print("Error in group "+str(i))
    coorext.append(coorext1)
nmalla=len(coorext)
print(narchivo,nmalla)

#
#Determining materials bonded for each cohesive element
for i in range(len(coh)):
    ladomat=[]
    for j in coh[i][1]:
        if tri[nod[j-ininum][2][0]-1][2] not in ladomat:
            ladomat.append(tri[nod[j-ininum][2][0]-1][2])
    coh[i].append(ladomat)
for i in coh:
    if len(i[3])==1:
        i[3]=i[3][0]-1
    else:
        for j in combina:
            if i[3] in j:
                i[3]=combina.index(j)

#Modifying joint materials
cont=0
for i in range(len(coorext)):
    nindex=-1
    for j in coordline:
        if coorext[i] in j:
            nindex=coordline.index(j)
    if nindex==-1:
        print('Coordinates not found for element '+str(i))
        cont=cont+1
    else:
        segm[nindex][24]='          segment 1 property:
'+str(coh[i][3])+'\n'
print('# Elements not found: '+str(cont))

#

```

```
#Data output
for i in range(len(seg)):
    for j in range(28):
        escribir.write(seg[i][j])

#
print(angle)

escribir.write('\n'+'\n'+'\n'+str(angle))
#
#Final
print('fin')
archivo.close()
escribir.close()
```

B. RESULTADOS DAS ANÁLISES DE VARIABILIDADE

Nas seguintes tabelas, são apresentados os resultados dos parâmetros macroscópicos obtidos dos modelos usados nas análises da variabilidade espacial e estrutural.

Tabela B.1. Parâmetros macroscópicos obtidos das modelagens aplicando a variabilidade espacial dos minerais.

Modelo	E_0 (GPa)	ν_0	CI (MPa)	CD (MPa)	UCS (MPa)	BTS (MPa)
1*	71.83	0.227	92.98	190.28	222.85	15.46
2	70.21	0.231	90.40	186.43	216.78	15.67
3	71.40	0.231	86.80	197.57	219.59	15.03
4	71.15	0.231	86.15	199.30	221.81	15.17
5	72.78	0.233	99.11	199.70	225.48	16.59
6	73.16	0.231	89.09	198.27	215.76	17.00
7	71.43	0.228	87.25	196.20	227.25	16.12
8	72.06	0.234	87.78	192.14	217.27	16.38
9	68.70	0.228	83.52	187.55	210.86	16.73
10	68.87	0.231	89.05	183.25	215.58	15.25
11	69.48	0.230	84.58	199.66	221.90	16.41
12	72.65	0.230	93.81	206.90	237.60	14.98
13	71.05	0.227	92.17	198.44	223.56	16.26
14	70.14	0.232	101.05	198.91	223.71	16.35
15	70.99	0.230	96.33	189.96	218.43	15.80
16	69.65	0.229	89.90	189.28	214.75	16.08
17	72.81	0.231	94.37	208.04	228.84	15.65
18	71.60	0.229	87.18	188.03	221.22	16.06
19	69.88	0.230	95.03	180.10	213.60	15.99
20	70.30	0.227	85.71	186.13	200.42	15.93
21	71.80	0.228	92.56	179.09	200.03	15.80
22	71.46	0.229	92.28	196.94	218.78	16.14
23	70.82	0.231	91.18	183.80	198.35	15.72
24	71.84	0.232	98.08	185.87	234.47	15.91
25	71.41	0.229	92.46	189.59	216.22	15.32
26	70.29	0.233	85.10	177.68	213.42	15.70
27	72.36	0.231	93.29	188.74	210.63	15.78
28	73.16	0.232	94.28	191.60	222.38	15.81
29	71.68	0.232	92.18	180.44	220.39	15.24
30	74.23	0.229	101.31	214.18	237.30	15.84

*Modelo base que define a estrutura dos blocos Voronoi

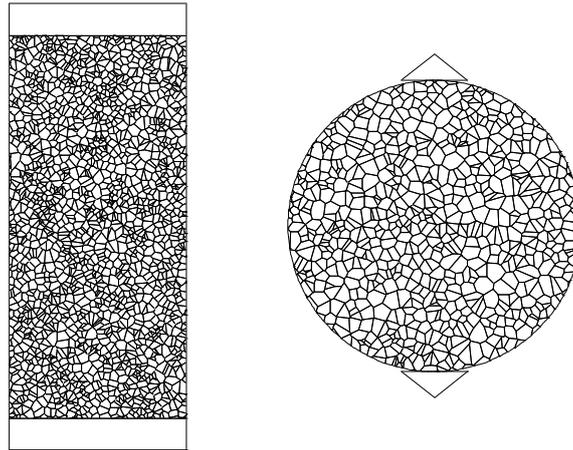


Figura B.1. Estrutura das juntas definida para todos os modelos com variabilidade espacial.

Tabela B.2 Parâmetros macroscópicos obtidos das modelagens aplicando a variabilidade estrutural dos blocos Voronoi.

Modelo	E_0 (GPa)	ν_0	CI (MPa)	CD (MPa)	UCS (MPa)	BTS (MPa)
1	71.83	0.227	92.98	190.28	222.85	15.46
2	73.26	0.228	78.65	196.20	220.82	15.00
3	69.52	0.228	95.23	176.45	213.04	16.21
4	72.22	0.228	88.08	190.23	223.81	15.78
5	70.03	0.227	90.09	189.93	218.57	13.95
6	76.64	0.227	99.16	206.55	228.39	16.25
7	70.74	0.229	86.09	190.16	201.73	16.02
8	71.63	0.229	87.52	197.28	220.85	16.09
9	74.78	0.223	112.09	205.70	223.23	16.88
10	72.27	0.228	82.90	202.68	222.71	15.34
11	75.02	0.228	92.09	206.35	229.62	14.76
12	69.47	0.223	85.08	194.15	223.30	15.15
13	70.62	0.228	85.86	186.97	217.17	15.98
14	70.70	0.231	90.93	194.45	215.85	16.02
15	74.67	0.228	96.74	215.01	244.96	15.89
16	74.11	0.225	95.96	180.10	209.29	16.02
17	70.60	0.230	81.17	184.58	221.95	15.35
18	70.53	0.229	91.45	182.54	219.79	15.38
19	72.24	0.229	88.10	193.38	203.77	14.26
20	68.50	0.227	88.92	201.86	225.87	15.77
21	73.40	0.227	100.03	196.99	215.82	15.70
22	68.11	0.228	87.98	176.95	213.08	16.51
23	69.77	0.228	85.05	186.53	216.60	16.08
24	78.61	0.226	95.94	208.82	233.49	15.61
25	72.75	0.220	94.34	197.95	215.00	14.75
26	70.94	0.228	91.53	203.18	223.79	16.14
27	71.01	0.226	97.26	192.82	222.40	15.62
28	69.38	0.224	89.96	189.79	210.44	15.66
29	72.85	0.220	88.83	207.71	230.66	15.53
30	72.92	0.226	88.98	181.68	222.72	15.82

C. CÓDIGO PYTHON (ABORDAGEM PROBABILÍSTICA)

A continuação, são apresentados os códigos implementados em Python para a inclusão da heterogeneidade material e de contatos no CVBM.

- Arquivo “RandomRS2.py”, usado para definir aleatoriamente as propriedades dos elementos do modelo.

```
# Open .txt documents
print('ini')

import random
import math

escribir=open('Output3.txt','w')
materiales=open('InputMaterials.txt','r')

#Model name
archivo=open('ModelFile.fea') #Modify

#Initial segment for read info of model
bound=a #Modify for correct line identification

#
#Data input

#Seed for random generation
seed1=10 #Modify
random.seed(seed1)

#Scaler color definition 1:rainbow, 2:blacktowhite, 3:whitetoblack,
4:redtoblue
scalecol=4
#Number of scale intervals
ncolor=12

#Continuum material properties

#Number of diferent materials #Modify
nmat=b #Modify
#Initial loading: 0=Field stress, 1=Field stress & body force, 2=Body
force, 3=None
load=c
#Unit weight (MN/m3)
rho=d
#Elastic tipe: 0=Isotropic, 1=Transv isotropic, 2=Ortho, 3=Hyperbolic
elastype=e
```

```

#Material type: 0=Elastic, 1=Plastic
matttype=f
#Failure criteria: 0=M-C, 1=H-B, 2=D-P, 3=H-B general, 4=Cam-clay, 5=Cam-
clay mod, 6=Function
failcrit=g
#Cohesive material properties
#Normal & shear stiffness(MPa/m)
kn=h #Modify
knks=i #Modify
#Failure criterio: 0=None, 1=M-C, 2=Bar-Ban, 3=Hyperbolic
cfailcrit=j
#Residual parameters activation: 0=no, 1=yes
rpar=k

#
#Data extraction from model file
a=archivo.readlines()
for line in a:
    if ' element 0 start:' in line:
        vorini=a.index(line)
    if 'materials mesh end:' in line:
        vorfin=a.index(line)
    if 'boundary '+str(bound)+' start:' in line:
        boundini=a.index(line)
    if 'v6 geometry end:' in line:
        boundfin=a.index(line)

voronoi=[]
for lineid in range(vorini,vorfin):
    voronoi.append(a[lineid])

segmentos=[]
for lineid in range(boundini,boundfin):
    segmentos.append(a[lineid])

#
#Inverse error function definition
def inverf(prob):
    numpi=math.pi
    A=[0.886226899,-1.645349621,0.914624893,-0.140543331]
    B=[-2.118377725,1.442710462,-0.329097515,0.012229801]
    C=[-1.970840454,-1.624906493,3.429567803,1.641345311]
    D=[3.543889200,1.637067800]
    signo=1.0

#Aproximation
    if prob<0:
        signo=-1.0
    Z=abs(prob)

```

```

    if z<0.7:
        prob2=z*z
        res=z*((A[3]*prob2+A[2])*prob2+A[1])*prob2+A[0])

res=res/(((B[3]*prob2+B[2])*prob2+B[1])*prob2+B[0])*prob2+1.0)
else:
    probl=(-math.log(0.5*(1-z)))**0.5
    res=((C[3]*probl+C[2])*probl+C[1])*probl+C[0])
    res=res/((D[1]*probl+D[0])*probl+1.0)

#Refinement
res=signo*res
res=res-(math.erf(res)-prob)/((2.0/numpi**0.5)*math.exp(-res*res))
res=res-(math.erf(res)-prob)/((2.0/numpi**0.5)*math.exp(-res*res))
res=res-(math.erf(res)-prob)/((2.0/numpi**0.5)*math.exp(-res*res))
return (res)

#
import random
import math

#Data input
variab=[]
for line in materiales:
    datoline=[]
    datotext=line.strip().split()
    for i in datotext:
        datoline.append(float(i))
    datoline.append(0)
    variab.append(datoline)
for i in range(len(variab)-1):
    if variab[i][1]==1:
        variab[i][3]=variab[i][3]*variab[i][0]
    elif variab[i][1]==2:
        variab[i][3]=(math.log(1+variab[i][3]**2))**0.5
        variab[i][0]=math.log(variab[i][0])-0.5*variab[i][3]**2
    elif variab[i][1]==3:
        variab[i][5]=variab[i][4]
        variab[i][4]=variab[i][3]
        variab[i][3]=variab[i][0]-variab[i][3]

#Random seed
seed1=variab[len(variab)-1][0]
random.seed(seed1)

#Random properties generation
materials=[]
# #No distribution
for i in range(nmat):

```

```

matele=[]
for j in range(len(variab)-1):
    if variab[j][1]==0:
        prob=0
        val=variab[j][0]
# #Normal and Logormal distribution
    elif variab[j][1]==1 or variab[j][1]==2:
        val=-100000
        valmin=variab[j][0]-4*variab[j][3]
        valmax=variab[j][0]+4*variab[j][3]
        while val<valmin or val>valmax or val<variab[j][2]:
            prob=random.random()
            res=inverf(2*prob-1)
            val=variab[j][0]+res*variab[j][3]*2.0**0.5
            if variab[j][1]==2:
                val=math.exp(val)
                valmax=math.exp(valmax)
                valmin=math.exp(valmin)
# #Weibull distribution
    elif variab[j][1]==3:
        val=-100000
        valmax=variab[j][4]*(math.log(1/(1-
0.99997)))**(1/variab[j][5])+variab[j][3]
        while val>valmax or val<variab[j][2]:
            prob=random.random()
            val=variab[j][4]*(math.log(1/(1-
prob)))**(1/variab[j][5])+variab[j][3]
# #Continuous uniform distribution
    elif variab[j][1]==4:
        val=-100000
        while val<variab[j][2]:
            prob=random.random()
            val=2*prob*(variab[j][0]-
variab[j][3])+variab[j][3]
# #Triangular distribution
    elif variab[j][1]==5:
        val=-100000
        while val<variab[j][2]:
            prob=random.random()
            if prob<=(variab[j][0]-
variab[j][3])/(variab[j][4]-variab[j][3]):
                val=variab[j][3]+(prob*(variab[j][4]-
variab[j][3])*(variab[j][0]-variab[j][3]))**0.5
            else:
                val=variab[j][4]-((1-
prob)*(variab[j][4]-variab[j][3])*(variab[j][4]-variab[j][0]))**0.5
        matele.append(val)
    materials.append([i+1,matele])

```

```

#
#Material properties output
escribir.write('Section 1'+'\n')
escribir.write('\n'+material properties:'+\n')
for i in range(nmat):
    escribir.write('Material '+str(materials[i][0])+'\n')
    escribir.write(str(load)+' '+str(rho)+' '+str(elastype)+'
'+str(materials[i][1][0])+
'+str(materials[i][1][0]/(2*(1+materials[i][1][1])))
    +' '+str(materials[i][1][1])+' 0 20000 20000 20000 0.2 0.2
0.2 '+str(mattype)+' '+str(failcrit)+' '+str(materials[i][1][2])+' '
    +str(materials[i][1][3])+' '+str(materials[i][1][4])+'
'+str(materials[i][1][4]*materials[i][1][5])+' '+str(materials[i][1][6])+
'
    +str(materials[i][1][6]*materials[i][1][7])+' 100 0 1 1
0.001 0.001 0.5 0.5 0 3 3 0 1 1 0.5 0 0 100 0 1 1 0.001 0.001 0.5 0.5 123 '
    +'2.5 0.025 1.3 2.5 0.15 600 500 0.25 0.7 0.5 0.1013 0.9 600
0.2 0 0 0 0 2.61 0.2 0 0 1 1 2 0 50 10 0 20000 400 0 0 1 50 10 0 0 0 '
    +str(materials[i][1][0])+' 0 0
'+str(materials[i][1][2]*materials[i][1][8])+' 1 1 0'+'\n')

escribir.write('\n'+joint properties:'+\n')
for i in range(nmat):
    escribir.write('Joint '+str(materials[i][0])+'\n')
    escribir.write(str(kn)+' '+str(kn/knks)+' 0.1 '+str(cfailcrit)+'
'+str(materials[i][1][9])+' '+str(materials[i][1][10])+'
'+str(materials[i][1][11])
    +' 90 9 28 0 0 20 0 0 10 0 20 0 0.9 0.5 0.1013 0 0 0 0 0
'+str(rpar)+' '+str(materials[i][1][10]*materials[i][1][12])+' '
    +str(materials[i][1][11]*materials[i][1][13])+' 0
'+str(materials[i][1][9]*materials[i][1][14])+' 0 1 1 0.7 0 0 0 0 20 0 10 0
0 0 0 1 0'+'\n')

#
#Material random assignment to voronoi regions and joints
#Voronoi material definition
datoline=[]
mat=[]
nn=0
for line in voronoi:
    datoline.append(line)
    nn=nn+1
    if nn==8:
        mat.append(datoline)
        datoline=[]
        nn=0
print(mat[0][0])

#Output data

```



```

if scalecol==1:
    rgblen=math.floor(255/(ncolor/2))
    for i in range(math.floor(ncolor/2)-1):
        red=255-rgblen*i
        green=rgblen*i
        blue=0
        if red<0: red=0
        if green>255: green=255
        rgb scale.append([red,green,blue])
    for i in range(ncolor-math.floor(ncolor/2)):
        red=0
        green=255-rgblen*i
        blue=rgblen*i
        if green<0: green=0
        if blue>255: blue=255
        rgb scale.append([red,green,blue])
    rgb scale.append([0,0,255])
#White to black scale color
elif scalecol==2 or scalecol==3:
    rgblen=math.floor(255/(ncolor-(ncolor-1)/ncolor))
    for i in range(ncolor-1):
        red=rgblen*i
        green=rgblen*i
        blue=rgblen*i
        if red>255: red=255; green=255; blue=255
        rgb scale.append([red,green,blue])
    rgb scale.append([255,255,255])
    if scalecol==3:
        rgb scale=list(reversed(rgb scale))
elif scalecol==4:
    rgbintlen=1/(ncolor-1)
    for i in range(ncolor):
        inter=i*rgbintlen
        if inter<0.25:
            red=0
            green=math.floor(255*inter/0.25)
            blue=255
        elif inter<0.5:
            red=0
            green=255
            blue=math.floor(255*(0.5-inter)/0.25)
        elif inter<0.75:
            red=math.floor(255*(inter-0.5)/0.25)
            green=255
            blue=0
        else:
            red=255
            green=math.floor(255*(1-inter)/0.25)
            blue=0

```

```

        rgbscale.append([red,green,blue])
print('RGB for each interval')
print(rgbscale)

#
#Colors for properties
#Sorting material properties
ordenprop=[]
for i in range(len(materials[0][1])):
    iprop=[]
    for j in range(len(materials)):
        iprop.append(materials[j][1][i])
    ordenprop.append(iprop)
for i in range(len(materials)):
    ordenprop[5][i]=ordenprop[4][i]*ordenprop[5][i]
    ordenprop[7][i]=ordenprop[6][i]*ordenprop[7][i]
    ordenprop[8][i]=ordenprop[2][i]*ordenprop[8][i]
    ordenprop[12][i]=ordenprop[10][i]*ordenprop[12][i]
    ordenprop[13][i]=ordenprop[11][i]*ordenprop[13][i]
    ordenprop[14][i]=ordenprop[9][i]*ordenprop[14][i]
print('Random generated property values')
print(ordenprop)

#Minimum and maximum values for each property
minmax=[]
for i in range(len(ordenprop)):
    imin=min(ordenprop[i])
    imax=max(ordenprop[i])
    minmax.append([imin,imax])
print('Min and Max values for each property')
print(minmax)

#Color in range definition
vcolor=[]
for i in range(len(minmax)):
    rlen=(minmax[i][1]-minmax[i][0])/ncolor
    mtxcolor=[]
    for j in range(len(materials)):
        rcolor=1
        if rlen>0:
            rcolor=math.ceil((ordenprop[i][j]-
minmax[i][0])/rlen)
            if rcolor==0: rcolor=1
            mtxcolor.append(rcolor)
    vcolor.append(mtxcolor)

#Output
escribir.write('\n'+'\n'+'\n'+'Color use in the corresponding material or
joint property'+'\n')

```

```

for i in range(len(vcolor)):
    escribir.write('\n'+Property color: '+str(i+1)+'\n')
    for j in range(len(vcolor[i])):
        escribir.write(' '+str(f"{j+1:02d}")+' ')
        for k in range(3):
            escribir.write(str(f"{rgbscale[vcolor[i][j]-
1][k]:03d}")+' ')
        escribir.write('\n')

escribir.write('\n'+'\n'+'\n'+'Joint basic colors'+'\n')
for i in range(len(vcolor[0])):
    escribir.write(' '+str(f"{i+1:02d}")+' 000 000 000'+'\n')

#
#Final
print('fin')
materiales.close()
archivo.close()
escribir.close()

```