

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA**

Maicon Soder

**ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES ELÁSTICAS ISOTRÓPICAS  
DE ROCHAS RESERVATÓRIO DE PETRÓLEO VIA  
HOMOGENEIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA**

Florianópolis

2014



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA**

Maicon Soder

**ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES ELÁSTICAS ISOTRÓPICAS  
DE ROCHAS RESERVATÓRIO DE PETRÓLEO VIA  
HOMOGENEIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. D. Sc. Eduardo Alberto Fancello

Co-orientador: Prof. Dr. Eng. Celso Peres Fernandes

Florianópolis

2014

Maicon Soder

**ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES ELÁSTICAS ISOTRÓPICAS  
DE ROCHAS RESERVATÓRIO DE PETRÓLEO VIA  
HOMOGENEIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA**

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.  
Florianópolis, 12/09/2014.

---

Armando Albertazzi Gonçalves Jr., Dr. Eng.  
Coordenador do Curso

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Eduardo Alberto Fancello, D. Sc.  
Orientador  
Universidade Federal de Santa Catarina

---

Clóvis Sperb de Barcellos, Ph.D.  
Universidade Federal do Santa Catarina

---

José Antônio Bellini da Cunha Neto, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

---

Paulo de Tarso Rocha Mendonça, Ph.D.  
Universidade Federal de Santa Catarina



*Aos meus pais, Helena e Laudio, e à minha  
irmã, Natássia, a quem devo uma valsa.*



## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente os meus pais, Helena e Laudio, as pessoas mais importantes da minha vida e à quem eu devo tudo que sou, pelo amor, carinho e apoio incondicional e irrestrito não só durante o desenrolar deste trabalho, mas em cada passo meu.

À minha irmã, Natássia, que esteve ao meu lado e foi minha companhia em Florianópolis, pela amizade e cumplicidade.

Ao Professor Eduardo A. Fancello, que me deu o privilégio de ser seu orientado desde 2007, por todos os ensinamentos, contribuição acadêmica, apoio e incentivo ao longo destes anos.

Ao meu co-orientador, Professor Celso P. Fernandes que propôs o tema deste trabalho e que foi muito importante para o entendimento e ambientação do problema.

À Iara F. Mantovani que forneceu as geometrias das rochas utilizadas no trabalho, sendo sempre cordial e solícita.

Ao Laboratório de Vibrações e Acústica (LVA/UFSC) que gentilmente cedeu acesso ao cluster para que os cálculos numéricos deste trabalho pudessem ser realizados, em especial ao Gustavo Martins que ajudou neste processo.

Aos amigos do GRANTE, companheiros de muitos cafés e açafá, que fizeram com que o dia-a-dia no laboratório fosse divertido e agradável e que contribuíram muito para execução deste trabalho e para o meu crescimento como pessoa.

Aos meus diversos amigos que, mesmo não contribuindo academicamente, foram fundamentais para a conclusão do trabalho.

À Petrobras e à CAPES pelo apoio financeiro.





## RESUMO

Para a melhor interpretação de dados obtidos durante a prospecção de campos de petróleo se faz necessário conhecer característica geológicas e físicas da formação rochosa onde o óleo se encontra armazenado, os reservatórios de petróleo. Dentre estas características estão as propriedades mecânicas elásticas.

As rochas que constituem os reservatórios têm uma microestrutura porosa, muitas vezes complexas, de difícil caracterização. O ramo que estuda estas propriedades é a física de rochas. Com os avanços na área de cálculos numéricos, tanto em métodos quanto em equipamentos, desenvolveu-se a física de rochas digitais, que se ocupa da caracterização das rochas por meio de simulações computacionais. Dentre os métodos computacionais usados para este propósito estão os algoritmos de homogeneização, que usam análises numéricas para a obtenção de propriedades homogeneizadas ou equivalentes de meios heterogêneos complexos.

Com o objetivo de desenvolver um código capaz de processar informações de uma dada geometria digitalizada de rocha e obter as propriedades efetivas da amostra usando um software comercial de Elementos Finitos, estudou-se os métodos disponíveis na literatura para a realização de tal tarefa. Escolheu-se um método de homogeneização que foi adaptado para o software escolhido. Todas estas etapas são detalhadas.

Por fim, o modelo elaborado foi testado com algumas geometrias de arenitos gerando estudos que indicam a influência de parâmetros de cálculo, como tamanho da amostra analisada ou número de repetições da microestrutura na amostra e as diferentes condições de contorno, no resultado final.

**Palavras-chave:** Homogeneização, propriedades elásticas equivalentes, rochas.



## ABSTRACT

The knowledge of geologic and geophysics characteristics of rock formation of oil reservoirs is necessary to better understand data obtained from prospecting oil fields. Elastic mechanics properties are among these characteristics. The complex porous micro structure of oil reservoir rocks is a challenge to their characterization.

During the last few decades, the progress in the field of numeric calculations (methods and hardware) allowed the development of methods for rock characterization by computational simulations using digital rock geometries, named digital rock physics. Among these computational methods are the homogenization algorithms, which use numerical analysis to obtain homogenized or equivalent properties of complex heterogeneous materials.

The methods available in the literature were studied in order to develop a system capable of process information of a given digital micro structure and obtain its effective elastic properties using a commercial software of Finite Element analysis. An homogenization method was chosen after the study and adapted for the FEM software. All the steps involved in this process are described in this work.

At the end, the model built was tested with two digital sandstone samples. It is shown how calculation parameters such as sample size, number of repetitions of the micro structure and different boundary conditions influence the final results.

**Keywords:** homogenization, effective elastic properties, rocks.



## LISTA DE FIGURAS

- 1 Exemplos de imagens 3D de rochas digitalizadas. A aresta dos cubos tem 1 mm de comprimento. Retirado de Dvorkin M. Armbruster (2008)..... 33
- 2 Deformações aplicadas na imagem da rocha para cálculo das propriedades efetivas. Seis casos são rodados, três deformações normais unitárias (a), (b) e (c), e três deformações cisalhantes unitárias (d), (e) e (f). Adaptado de Madadi *et al.* (2009) ..... 36
- 3 Corpo na macroescala, à esquerda, com detalhe da microestrutura de um ponto  $\mathbf{x}$  arbitrário, à direita. O domínio micro,  $\Omega_\mu$  pode ser decomposto por fases sólida,  $\Omega_\mu^s$  e vazios,  $\Omega_\mu^v$  ... 39
- 4 Decomposição aditiva do deslocamento da microescala em duas parcelas. A primeira é proporcional à deformação macroscópica enquanto a segunda é denominada de deslocamentos flutuantes. .... 42
- 5 Campo de deslocamento arbitrário respeitando o modelo de Taylor para um domínio qualquer. Toda a deformação é homogênea de forma que a parcela flutuante não existe. .... 50
- 6 Decomposição aditiva de um campo de deslocamento arbitrário com a imposição de deslocamentos lineares no contorno. Esta classe tem deslocamentos flutuantes nulos no contorno, de forma que o único deslocamento nesta região é o da parcela homogênea. .... 51

7	<p>Campo de deslocamento arbitrário da classe PBC decomposto aditivamente. No contorno da parcela flutuante são impostas condições para que pares de nós localizados em arestas opostas tenham o mesmo deslocamento, garantindo assim a periodicidade da solução. ....</p>	52
8	<p>Repetição de um RVE com condições de contorno de Taylor (a), com deslocamentos lineares no contorno (b) e deslocamentos flutuantes periódicos no contorno (c). A imposição das diferentes condições de contorno garantem que a micro estrutura (delimitada pelas linhas espessas) se "encaixem" com a outras semelhantes, garantindo a formação de um meio com campo de deslocamentos contínuo. ....</p>	54
9	<p>RVE na configuração original, à esquerda, e na configuração deformada, à direita, após a aplicação de uma deformação normal unitária na direção <math>x</math>. Os nós mostrados na aresta superior estão igualmente espaçados e mantém esta característica após a deformação. ....</p>	57
10	<p>RVE fictício com nós nas arestas, nos quais serão aplicadas condições de contorno de periodicidade. ....</p>	59
11	<p>Imagem da geometria MP1 300. Obtida através de microtomografia, ela é representada por <math>300^3</math> voxels, com cada voxel tendo <math>4,6 \mu\text{m}</math> de aresta. Verde e branco representam os grãos enquanto vermelho e preto representam poros. ....</p>	68
12	<p>Imagem da geometria MP2 300. Obtida através de microtomografia, ela é representada por <math>300^3</math> voxels, com cada voxel tendo <math>5,6 \mu\text{m}</math> de aresta. Verde e branco representam os grãos enquanto vermelho e preto representam poros. ....</p>	68

13	Imagem da geometria MP2 600. Obtida através de microtomografia, ela é representada por $600^3$ voxels, com cada voxel tendo $5,6 \mu m$ de aresta. Verde representa os grãos enquanto vermelho representa poros. ....	69
14	Ilustração do algoritmo usado para a definição das propriedades materiais aplicadas nos elementos em função da fração de volume. ....	72
15	Geometrias geradas utilizando o método descrito no estudo 4.2. As geometrias são criadas pela repetição linear do mesmo padrão, apresentado em (a). ....	73
16	Módulo volumétrico homogeneizado obtido utilizando 1, 2 e 3 repetições lineares da microestrutura básica, para as três condições de contorno diferentes. ....	74
17	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido utilizando 1, 2 e 3 repetições lineares da microestrutura básica, para as três condições de contorno diferentes. ....	74
18	Amostra de $100^3$ voxels discretizada com $30^3$ elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com $460 \mu m$ de aresta. ....	76
19	Amostra de $200^3$ voxels discretizada com $60^3$ elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com $920 \mu m$ de aresta. ....	77
20	Amostra de $300^3$ voxels discretizada com $30^3$ elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com $1380 \mu m$ de aresta. ....	77
21	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentadas com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. ....	78



22	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentadas com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	79
23	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	80
24	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	80
25	Amostra de $100^3$ voxels discretizada com $30^3$ elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com $560 \mu m$ de aresta. . . . .	81
26	Amostra de $200^3$ voxels discretizada com $60^3$ elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com $1020 \mu m$ de aresta. . . . .	82
27	Amostras utilizadas na análise de convergência da geometria MP2 300. O tamanho do voxel foi aumentado na proporção de 3 para 10. A segmentação foi feita em duas e cinco fases. A amostra conta com $1680 \mu m$ de aresta . . . . .	82
28	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	83
29	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	83
30	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	84

31	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	85
32	Comparação entre os módulos de cisalhamento homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP1 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	87
33	Comparação entre os módulos volumétricos homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP1 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	87
34	Comparação entre os módulos de cisalhamento homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP2 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	88
35	Comparação entre os módulos volumétricos homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP2 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	89
36	Exemplos de sub-amostras analisadas neste estudo. As geometrias tem $60^3$ elementos e representam $\frac{1}{27}$ da geometria MP2 600. . . . .	91
37	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	91
38	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes. . . . .	92

39	Módulo volumétrico homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes. ....	93
40	Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes. ....	94

## LISTA DE TABELAS

1	Deslocamentos a serem aplicados nos nós da geometria indicada na Figura 9 a fim de aplicar a condição de contorno de deslocamentos lineares no contorno. . . . .	57
2	Nós pertencentes a cada aresta conforme representado na Figura 10. Cada nó está em coluna equivalente ao seu par na aresta oposta, como por exemplo nós 1 e 3 nas arestas $\Lambda_2^-$ e $\Lambda_2^+$ , respectivamente. . . . .	59
3	Propriedades materiais utilizadas nas homogeneizações realizadas. Valores retirados de Andrä <i>et al.</i> (2013b). Propriedades para densidades intermediárias calculadas segundo equação (4.1). . . . .	70
4	Resultados mínimos, máximos e médios obtidos para o módulo de cisalhamento e volumétrico nas 27 subamostras com $60^3$ voxels com as três condições de contorno estudadas. . . . .	92
5	Resultados mínimos, máximos e médios obtidos para o módulo de cisalhamento e volumétrico nas 8 subamostras com $90^3$ voxels com as três condições de contorno estudadas. . . . .	94
6	Resultados médios de módulo volumétrico e cisalhamento obtidos nas análises de subamostras com $60^3$ e $90^3$ voxels. . . . .	95



## LISTA DE SÍMBOLOS

$\Omega$	Domínio da macroescala
$l$	Comprimento característico da macroescala [ $m$ ]
$\mathbf{x}$	Posição na macroescala [ $m$ ]
$\Omega_\mu$	Domínio microscópico
$l_\mu$	Comprimento característico da microescala [ $m$ ]
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensão macroscópica [ $GPa$ ]
$t$	Tempo [ $s$ ]
$\mathbb{F}$	Relação constitutiva entre campos de deformação e tensão da macroescala
$\boldsymbol{\varepsilon}^t$	História da deformação macroscópica
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Deformação macroscópica [ $m/m$ ]
$\mathbf{D}^e$	Tensor de elasticidade homogeneizado do elemento de volume [ $GPa$ ]
$V_\mu$	Volume da microescala [ $m^3$ ]
$\mathbf{y}$	Variável de posição na microescala [ $m$ ]
$\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$	Deformação microscópica
$\mathbf{u}_\mu$	Campo de deslocamentos da microescala [ $m$ ]
$\partial\Omega_\mu$	Contorno do domínio microscópico
$\mathbf{n}$	Vetor unitário normal ao contorno
$\tilde{\mathbf{u}}_\mu$	Campo de deslocamentos flutuantes microscópicos [ $m$ ]
$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$	Campo de deformações flutuantes na microescala [ $m/m$ ]
$\mathcal{K}_\mu^*$	Conjunto dos deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringidos
$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$	Conjunto dos deslocamentos microscópicos flutuantes cinematicamente admissíveis minimamente restringidos
$\mathcal{K}_\mu$	Conjunto real dos campos de deslocamento cinematicamente admissíveis
$\tilde{\mathcal{K}}_\mu$	Conjunto real dos deslocamentos flutuantes cinematicamente admissíveis
$\mathcal{V}_\mu$	Campo dos deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis

$\boldsymbol{\eta}$	Campo de deslocamento virtual na microescala
$\boldsymbol{b}$	Campo de força de corpo [ $m/s^2$ ]
$\boldsymbol{t}^e$	Tensões externas no contorno [ $N/m^2$ ]
${}^{hom}\mathbf{D}$	Operador constitutivo homogeneizado [ $GPa$ ]
$K$	Módulo Volumétrico [ $MPa$ ]
$G$	Módulo de Cisalhamento [ $MPa$ ]
$\tau_{xy}$	Tensão cisalhante no plano XY [ $GPa$ ]
$\gamma_{xy}$	Deformação cisalhante no plano XY [ $m/m$ ]
$V$	Volume [ $m^3$ ]
$P$	Pressão [ $GPa$ ]

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	27
1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS .....	27
1.2 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO .....	29
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> .....	31
2.1 FÍSICA DE ROCHAS DIGITAL .....	31
2.1.1 Métodos Estáticos .....	35
2.1.2 Métodos Dinâmicos .....	36
2.2 O ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO .....	38
2.3 HOMOGENEIZAÇÃO .....	39
2.3.1 Deformação homogeneizada .....	40
2.3.2 Decomposição aditiva .....	42
2.3.3 Conjuntos cinematicamente admissíveis .....	43
2.3.4 Equilíbrio do RVE .....	44
2.3.5 Tensão homogeneizada .....	45
2.3.6 Princípio de Hill-Mandel .....	46
2.3.7 O tensor de elasticidade homogeneizado .....	47
2.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO .....	49
2.4.1 Modelo de Taylor .....	49
2.4.2 Deslocamentos lineares no contorno .....	50
2.4.3 Deslocamentos flutuantes periódicos no contorno .....	51
2.4.4 Tensões constantes no contorno .....	52
<b>3 IMPLEMENTAÇÃO</b> .....	55
3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO .....	55
3.1.1 Deslocamentos lineares no contorno .....	56
3.1.2 Deslocamentos periódicos no contorno .....	58
3.1.3 Tensões constantes no contorno .....	60



3.2 DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS A PARTIR DA MATRIZ ANISOTRÓPICA .....	63
<b>4 RESULTADOS .....</b>	<b>67</b>
4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS .....	67
<b>4.1.1 Geometrias .....</b>	<b>67</b>
<b>4.1.2 Propriedades materiais .....</b>	<b>69</b>
<b>4.1.3 Redução do número de voxels da geometria .....</b>	<b>70</b>
4.2 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA EM RELAÇÃO AO TAMANHO DO RVE CONSIDERANDO A PERIODICIDADE DA MICROESTRUTURA .....	71
4.3 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA EM RELAÇÃO AO TAMANHO DO RVE CONSIDERANDO MICROSTRUTURA NÃO PERIÓDICA (ROCHA) .....	75
<b>4.3.1 RVEs baseados em MP1 300 .....</b>	<b>76</b>
<b>4.3.2 RVEs baseados em MP2 300 .....</b>	<b>79</b>
4.4 COMPARAÇÃO ENTRE SEGMENTAÇÃO COM DUAS E CINCO FASES .....	85
<b>4.4.1 RVEs baseados em MP1 300 .....</b>	<b>85</b>
<b>4.4.2 RVEs baseados em MP2 300 .....</b>	<b>86</b>
4.5 ESTUDO DA VIABILIDADE DE ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES USANDO SUB-AMOSTRAS DO RVE .....	89
<b>4.5.1 Amostras 60<sup>3</sup> .....</b>	<b>90</b>
<b>4.5.2 Amostras 90<sup>3</sup> .....</b>	<b>92</b>
<b>4.5.3 Comparação entre 60<sup>3</sup> e 90<sup>3</sup> .....</b>	<b>93</b>
<b>5 DISCUSSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>97</b>

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

O petróleo, quando de sua formação, migra de sua rocha formadora até encontrar uma rocha permeável porosa onde, devido à certas condições termodinâmicas e morfológicas, estaciona e fica retido em seus poros, formando um reservatório. Quando encontrada uma área que apresenta uma formação geológica com potencial para conter óleo, alguns testes podem ser efetuados para se determinar se realmente há hidrocarbonetos na região.

Uma das diversas formas de se realizar a prospecção numa reserva são os métodos sísmicos, no qual ondas mecânicas são propagadas em direção ao reservatório. Pela diferença das propriedades mecânicas das rochas, presença e quantidade de petróleo armazenado, profundidade do reservatório, entre outros, as ondas sofrem reflexões e difrações. Capta-se então o reflexo destas ondas e através da correta interpretação destes dados, pode-se obter uma imagem geológica da área (THOMAS, 2001).

Esta interpretação trata da transformação dos dados geofísicos, obtidos durante a sísmica, em propriedades de reservatório. Descobrir uma relação entre as propriedades do reservatório e os dados obtidos nos testes é um ponto crucial neste processo e necessita da caracterização das rochas do reservatório. Por exemplo, para se obter uma relação entre a saturação da rocha e as características da propagação das ondas se faz necessário obter propriedades elásticas efetivas da rocha que, geralmente, apresenta uma microestrutura porosa complexa e com propriedades anisotrópicas.

Um dos principais meios usados para a caracterização mecânica das rochas necessita de amostras do material do poço ou de rochas similares à esperada para a região que se analisa, chamadas de testemunhos (DVORKIN M. ARMBRUSTER, 2008).

Os testemunhos são retirados em diversas posições do poço, com intervalos regulares entre as amostras, e deles são confeccionados corpos de provas, chamados de *plugs* que, por sua vez, são testados permitindo, em combinação com os resultados de *logging tests* (testes realizados baixando instrumentos ao longo do poço) obter uma estimativa da variação, ao longo do reservatório, de propriedades como a porosidade da rocha, permeabilidade intrínseca, entre outros. Os testes realizados para as obtenções destas propriedades são onerosos, demorados e necessitam de mão-de-obra especializada.

Uma alternativa com um custo menos elevado à tais ensaios é a análise de amostras rochas digitalizadas, também obtidas a partir dos testemunhos ou de fragmentos de rocha provenientes do processo de perfuração.

Pode-se aplicar a fragmentos de rochas a técnica de microtomografia, que consiste num processo de obtenção de uma representação tridimensional da estrutura rochosa (KETCHAM; CARLSON, 2001). Com a representação geométrica em mãos é possível realizar simulações numéricas para a obtenção de propriedades mecânicas homogeneizadas da rocha.

As propriedades ditas homogeneizadas ou macroscópicas são obtidas através procedimentos que identificam um valor médio de uma distribuição da mesma propriedade na microescala que se espera ser um valor representativo dela. Essa transição de propriedades da micro para a macroescala caracteriza os chamados procedimentos de homogeneização (NETO; FEIJÓ, 2006).

Tais procedimentos, ou operadores de homogeneização, são usados para, dentre outras aplicações, obter propriedades equivalentes de materiais microestruturados ou multifásicos, sendo que cada uma destas fases apresenta propriedades próprias. A escala geométrica que distingue as fases, entretanto, é muito diferente da escala do corpo a ser analisado, situação típica que caracteriza os problemas multiescala. Este é o caso das rochas de reservatórios de petróleo.

O método consiste, de maneira simplificada, em identificar uma célula

representativa de volume, RVE, que caracteriza a microestrutura do material e realizar ensaios numéricos dos quais se obtém estimativas da matriz constitutiva de um material homogêneo equivalente à microestrutura.

Tendo um modelo numérico bem calibrado e versátil seria possível obter os valores das propriedades mecânicas elásticas mais rapidamente ou, ao menos, uma estimativa inicial delas, de forma a ajudar na interpretação dos dados sísmicos.

O objetivo deste trabalho é o estudo da fundamentação teórica dos modelos de homogeneização e implementação numérica de um algoritmo que permita estimar propriedades elásticas de microestruturas de rocha. Com vistas à eventual continuação e aplicação deste desenvolvimento em trabalhos futuros, foi previsto que a implementação deverá ser realizada utilizando um código de elementos finitos comercial.

## 1.2 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Grande parte do trabalho teórico é apresentado no Capítulo 2. Neste é feita uma descrição dos diferentes métodos presentes na literatura utilizados para calcular propriedades homogêneas de materiais. Continua com a definição do denominado volume elementar representativo (RVE) e, em seguida, é apresentada a formulação de homogeneização utilizada neste trabalho.

O Capítulo 3 mostra como as restrições cinemáticas impostas pelas diferentes condições de contorno possíveis no RVE devem ser adaptadas para sua implementação num código comercial de Elementos Finitos. Também apresenta o método usado para obter as propriedades elásticas (isotrópicas) de interesse a partir da matriz constitutiva (anisotrópica) resultante do processo de homogeneização.

Alguns estudos realizados com o modelo implementado neste trabalho

são apresentados no Capítulo 4. Eles investigam como o modelo se comporta frente às diferentes condições de contorno, à diferentes tamanhos de geometria de uma mesma malha, entre outros.

Por fim, o Capítulo 5 apresenta as considerações finais do trabalho, conclusões obtidas e sugestões para prosseguimento desta pesquisa.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 FÍSICA DE ROCHAS DIGITAL

Entender como propriedades físicas básicas das rochas, como composição mineral, pressões nos poros, permeabilidade, conteúdo dos poros e características geométricas (forma dos poros, laminações, fraturas, etc.) controlam as propriedades macroscópicas das rochas é um fator determinante para uma melhor interpretação de medições geofísicas (ARNS *et al.*, 2002).

O ramo da geofísica chamado de física de rochas (*rock physics*) se ocupa de estudar e modelar as relações existentes entre propriedades físicas macroscópicas ou aparentes de um meio rochoso com as propriedades físicas básicas associadas à microestrutura da rocha que constitui o meio. Para tal, é frequente realizar estudos sobre os processos que ocorrem na escala dos poros e, a partir destes dados, estimar ou identificar as propriedades efetivas (macroscópicas) da amostra.

Dentre os principais fatores que influenciam as propriedades das rochas porosas, devem ser citadas características microscópicas como a morfologia das fases sólidas e dos vazios ou poros, assim como das conexões ou interfaces entre estes poros e a matriz.

Devido a limitações tecnológicas, por muito tempo não houve possibilidade de se caracterizar com detalhes a microestrutura na escala dos poros afim de estudar sua influência nas propriedades macroscópicas. Sendo assim, os modelos disponíveis para identificação de propriedades foram construídos a partir de soluções analíticas baseadas em microestruturas idealizadas calibradas com resultados experimentais ou em relações empíricas obtidas estatisticamente através de medições em laboratório. Este tipo de abordagem é parte do campo denominado física de rochas convencional e formam a base de

uma técnica bem estabelecida na área. Contudo se trata de um método limitado em muitos aspectos, sendo muito simplificados em termos geométricos e em termos de interações dentro da microestrutura. Relações analíticas para o cálculo de propriedades efetivas de rochas podem ser encontradas em Mavko *et al.* (2009).

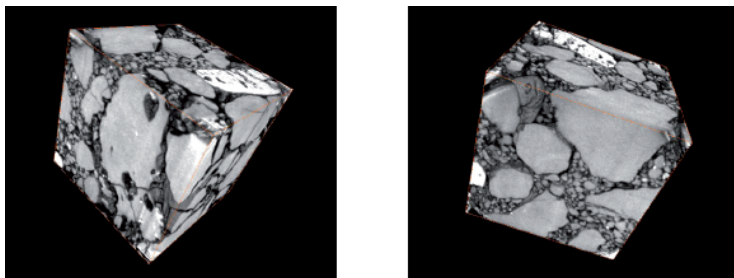
Nas duas últimas décadas a consolidação e disseminação do uso de métodos numéricos propiciou o desenvolvimento de uma abordagem alternativa à física de rochas convencional, conhecida como física de rochas digital (*digital rock physics*, DRP) ou física de rochas computacional, definida em Dvorkin *et al.* (2011) como simulações computacionais de processos no espaço poroso para a obtenção de propriedades efetivas da rocha.

Este acontecimento foi desencadeado pelo surgimento de tecnologias que tornaram possível a digitalização da geometria das rochas com detalhamentos na escala dos poros e pelo crescimento da capacidade computacional que viabilizou o cálculo das propriedades macroscópicas de amostras porosas a partir da sua microestrutura utilizando simulações numéricas.

Uma análise de DRP pode ser dividida em três passos fundamentais (ANDRÄ *et al.*, 2013a): digitalização da rocha; segmentação das fases; e simulação de processos físicos com a microestrutura para determinação de propriedades efetivas.

O principal equipamento utilizado para a digitalização de rochas é o microtomógrafo computadorizado de raios-x ( $\mu$ -CT), que permite gerar imagens 3D de materiais porosos complexos. Elas são formadas por várias imagens 2D obtidas por raios-x que são usadas para formar a representação tridimensional.

Com a tomografia, é possível obter a geometria interna de objetos, através de variações na densidade e composição atômica dos constituintes (MEES; LONDON, 2003). Uma das principais vantagens deste método é que ele é não invasivo e não destrutivo, preservando assim as propriedades originais



**Figura 1: Exemplos de imagens 3D de rochas digitalizadas. A aresta dos cubos tem 1 mm de comprimento. Retirado de Dvorkin M. Armbruster (2008)**

da amostra.

Por meio destas imagens é possível examinar a microestrutura da rocha e obter propriedades efetivas da amostra em questão. Na Figura 1 são exibidas amostras de areia betuminosa com um milímetro de aresta. Nelas, é possível observar grãos maiores, rachaduras, poros preenchidos com betume, ar e outras pequenas partículas.

Em Ketcham e Carlson (2001) são mostradas e explicadas técnicas de aquisição e interpretação de imagens com aplicações em geociências. Uma revisão mostrando o estado da arte desta tecnologia, também aplicada em geociências, pode ser encontrada em Cnudde e Boone (2013).

A segmentação consiste em identificar e classificar as fases, poros e diferentes materiais presentes nas imagens digitalizadas, ou seja, transformar imagens constituídas por tons de cinza em um formato discreto que permita a identificação do espaço poroso e das diferentes fases constituintes.

O elevado número de imagens que se tem numa geometria dificulta que tal atividade seja feita de forma manual. Deste modo usam-se algoritmos para realizar a segmentação, lançando-se mão de processos como filtragem espacial, remoção de ruído, limiarização das fronteiras das fases e operações morfológicas (ANDRÄ *et al.*, 2013a).

O resultado da segmentação não é único e depende tanto do algoritmo



usado como da escolha, por parte do usuário, de parâmetros de controle e de qualidade. Para uma revisão dos métodos de segmentação veja Iassonov *et al.* (2009)

As duas etapas anteriores têm como objetivo a obtenção de uma geometria digitalizada que represente bem a geometria real.

Assim, a disponibilidade da definição (digital) da geometria, aliada às técnicas de cálculo numérico, abre a oportunidade para simular processos físicos que acontecem na escala dos poros, como interação entre poros, fluxo de fluidos, efeitos de propagação e atenuação de ondas, afim de se obter as propriedades efetivas da rocha.

Simulando o fluxo de um fluido pela rocha estima-se a permeabilidade da mesma, a passagem de uma corrente elétrica permite calcular a resistividade enquanto uma deformação elástica fornecerá o módulo de elasticidade e, por consequência, a velocidade da onda elástica no meio (ANDRÄ *et al.*, 2013a).

Ressalta-se que o fato de representar processos que ocorrem na micro-escala da rocha permite que se identifique como as propriedades são governadas por estes fenômenos, o que seria impraticável usando métodos analíticos ou outros meios tradicionais de medição.

Além de uma representação fiel da amostra rochosa, as imagens digitalizadas permitem realizar alterações na geometria de forma a produzir variantes da mesma através de alterações de grãos e poros, introdução de partículas no espaço poroso, troca do material constituinte, entre outros. Isto possibilita, com o uso de métodos numéricos de cálculo, entender como cada uma destas variações ou fenômenos influem na propriedade macroscópica (DVORKIN *et al.*, 2012).

Este é o contexto em que o presente trabalho se insere. A partir da disponibilidade da descrição geométrica detalhada da microestrutura e da possibilidade de se utilizar uma técnica numérica para a simulação de um fenômeno físico definido no domínio da microestrutura, é possível executar

um procedimento de transição de escala, conhecido como homogeneização e obter propriedades macroscópicas representativas do meio estudado.

Esta dissertação versa sobre o uso desta ferramenta para identificação de propriedades elásticas da microestrutura da rocha como se esta fosse um meio homogêneo. Estas propriedades macroscópicas são também conhecidas como propriedades médias, homogeneizadas ou aparentes.

As duas abordagens numéricas mais utilizadas para este fim são as baseadas em simulações dinâmicas (propagação de ondas) e as quasiestáticas.

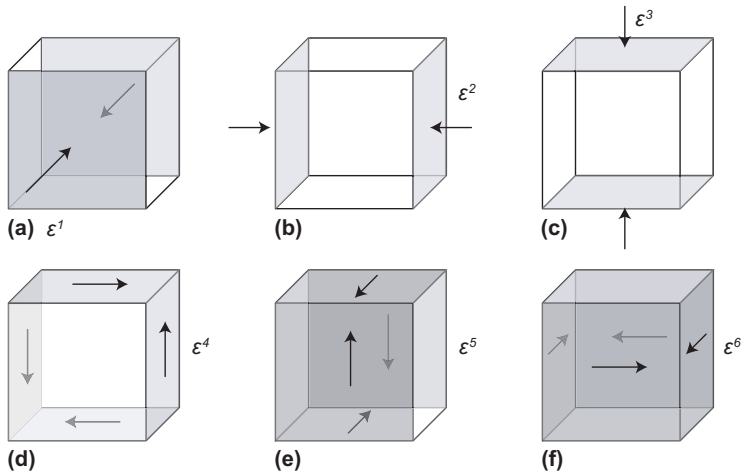
### **2.1.1 Métodos Estáticos**

Esta abordagem é largamente empregada para o cálculo de propriedades elásticas equivalentes. A técnica mais comum nesta abordagem é o método dos elementos finitos (MEF) (FISH; BELYTSCHKO, 2007; HUGHES, 1987) seguido pelo método de diferenças finitas (MDF) (THOMAS, 1995; SMITH, 1985).

Garboczi (1998) publicou um manual com algoritmos capazes de realizar cálculos de propriedades elétricas e mecânicas efetivas usando tanto MEF quanto MDF de geometrias aleatórias 2D e 3D. Há também, neste trabalho, uma descrição da formulação usada pelo autor.

O equacionamento clássico em mecânica dos sólidos, utilizado tanto em Garboczi (1998) quanto em outros como Neto e Feijóo (2006) e Arns *et al.* (2002), é baseado em um problema de valor de contorno, que em casos de elasticidade pode ser formulado como minimização de uma energia potencial.

O processo de homogeneização, em poucas palavras, consiste na execução de 'ensaios' sobre um setor da microestrutura denominado elemento representativo de volume (*representative volume element*, RVE). A resposta numérica a estes ensaios fornecem campos (deslocamentos, deformações, tensões, densidade de energia, etc.) cujos valores médios no



**Figura 2: Deformações aplicadas na imagem da rocha para cálculo das propriedades efetivas. Seis casos são rodados, três deformações normais unitárias (a), (b) e (c), e três deformações cisalhantes unitárias (d), (e) e (f). Adaptado de Madadi *et al.* (2009)**

RVE são interpretados como valores homogeneizados ou macroscópicos.

A Figura 2 mostra um conjunto de ensaios, controlados por deformações aplicadas no modelo, para a obtenção das propriedades desejadas em um caso tridimensional. Estes ensaios consistem em deformações unitárias em cada uma das direções normais e cisalhantes.

Neste tipo de formulação, as equações de equilíbrio são um problema valor de contorno. Isso significa que o resultado depende das condições de contorno especificadas. Na Seção 2.4 são descritas condições de contorno usadas neste trabalho e como estas condições podem influenciar no resultado final.

### 2.1.2 Métodos Dinâmicos

A abordagem dinâmica segue os mesmos princípios na seção anterior, mas o modelo de representação utilizado é o modelo de propagação de ondas,

que simula a passagem da onda mecânica na microestrutura da rocha. O MEF e o MDF permitem este cálculo, mas o segundo é mais frequentemente utilizado nesta abordagem. Neste caso estuda-se a passagem de um pulso de onda cisalhante ou compressiva aplicado numa extremidade do RVE. O tempo que a onda leva para passar pelo meio é calculado e, através dele, tem-se subsídios para estimar a velocidade de propagação da mesma e, com esta, o módulo efetivo da rocha.

Mais informações sobre este modelo podem ser encontradas em Saenger *et al.* (2000). Exemplos de aplicações podem ser encontrados em Saenger *et al.* (2011).

Além do cálculo das propriedades efetivas, os métodos dinâmicos permitem a utilização de uma formulação capaz de captar fenômenos como a atenuação e dispersão de ondas. Segundo Quintal *et al.* (2011), a identificação do principal mecanismo físico responsável pela atenuação de onda em frequências sísmicas é um dos principais desafios na área de DRP.

Em Andrä *et al.* (2013b) e Saenger (2008) são feitas comparações entre métodos estáticos e dinâmicos. No primeiro uma comparação é feita, não apenas entre diferentes métodos como também entre algoritmos para os mesmos métodos e comenta sobre a importância destes. Os resultados obtidos e mostrados neste trabalho apontam proximidade entre os métodos estáticos e dinâmicos, com os dinâmicos dando valores levemente inferiores àqueles obtidos pelos métodos estáticos. Já no segundo, é mostrado que as duas abordagens podem oferecer resultados precisos, sem viés para nenhum dos métodos, se aplicados corretamente. É comentado também que, em geral, os métodos estáticos são mais eficientes do ponto de vista computacional.

Ainda, segundo Saenger (2008), métodos dinâmicos permitem uma comparação mais direta com experimentos de propagação de ondas, visto que simulam o mesmo fenômeno físico dos testes. Por outro lado, afirma-se em Andrä *et al.* (2013b) que não se pode comparar diretamente experimentos

com simulações devido ao tamanho das amostras comparadas. Enquanto em simulações são utilizadas amostras de poucos milímetros de comprimento em testes experimentais são usados *core samples* que, no mínimo, tem vários centímetros de comprimento.

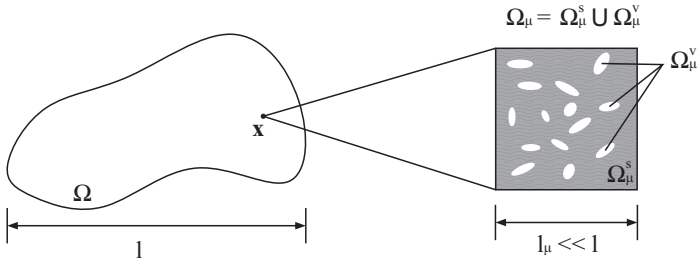
## 2.2 O ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO

Um dos aspectos importantes em procedimentos de homogeneização é a escolha da dimensão e da forma da parcela finita de material heterogêneo que será utilizada para identificar as propriedades homogeneizadas. Esta parcela é nomeada Elemento de Volume Representativo (Representative Volume Element - RVE).

Segundo Saenger (2008), não há regras específicas para se determinar o tamanho do RVE. Porém, como regra geral, deve possuir dimensões suficientemente grandes para abrigar uma amostra representativa das heterogeneidades no meio e ao mesmo tempo suficientemente pequena para que seja considerada uma representação local na escala macroscópica.

Ostojca-Starzewski (1999) faz um estudo sobre efeitos de escala em processos de homogeneização quase-estática a partir do qual mostra que os resultados das análises com deslocamentos lineares no contorno darão o limite superior das propriedades efetivas, enquanto que o modelo com tensões constantes no contorno (LBD) fornecerá o limite inferior das mesmas. Desta forma, com os métodos quase-estáticos, pode-se calcular apenas uma faixa de valores dentro da qual as propriedades estarão inseridas. A condição de deslocamentos flutuantes periódicos no contorno dará um valor intermediário aos outros dois.

Hill (1963) escreve que um RVE está bem definido quando resultados obtidos com tensões constantes no contorno (UTB) e LBD convergem. Entretanto, isto pode ocorrer com dimensões de amostra excessivamente grandes,



**Figura 3:** Corpo na macroescala, à esquerda, com detalhe da microestrutura de um ponto  $x$  arbitrário, à direita. O domínio micro,  $\Omega_\mu$  pode ser decomposto por fases sólida,  $\Omega_\mu^s$  e vazios,  $\Omega_\mu^v$

envolvendo altos custos numéricos.

Em simulações de propagação de ondas, não se observa a existência de limites superiores e inferiores. Nestes casos, os resultados são influenciados principalmente pela relação entre heterogeneidades e comprimento de ondas.

Nas simulações estáticas, um fator importante para o tamanho do RVE é o contraste entre as fases.

### 2.3 HOMOGENEIZAÇÃO

Esta seção apresenta a descrição do modelo de homogeneização que é utilizado no presente trabalho. Tal formulação é baseada no trabalho referenciado em Neto e Feijóo (2006).

Considere o corpo da Figura 3, ocupando domínio  $\Omega$  na macroescala, com comprimento característico  $l$ , e considere um ponto material  $x$  dessa escala, representado à direita da mesma figura mediante um elemento de volume representativo definido na microescala. O domínio ocupado por este elemento representativo é  $\Omega_\mu$  ao qual se atribuiu um comprimento característico  $l_\mu \ll l$ .

Em  $\Omega_\mu$  é possível distinguir as heterogeneidades do material que, embora não distinguíveis no comprimento característico da macroescala, pos-

suem direta influência no comportamento mecânico do corpo.

Considera-se, por facilidade de apresentação, um elemento representativo de volume (RVE) com apenas duas fases, uma sólida, indicada pelo subíndice  $s$  e outra indicando ausência de material ou fase "vazia", indicada pelo subíndice  $v$ .

O processo de homogeneização do modelo de comportamento de material consiste em determinar uma relação constitutiva que relacione a tensão macroscópica com a deformação macroscópica na forma

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathbb{F}(\boldsymbol{\varepsilon}^t) \quad (2.1)$$

sendo  $\boldsymbol{\sigma}(t)$  a tensão macroscópica no ponto  $\mathbf{x}$  e  $\boldsymbol{\varepsilon}^t$  a história do tensor de deformação.

O presente trabalho está restrito à cinemática linearizada (pequenos deslocamentos e deformações) e a um modelo constitutivo homogeneizado de elasticidade linear, isto é, uma lei que independe da história das deformações e representável pela equação vetorial linear

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}^e : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.2)$$

onde o tensor  $\mathbf{D}^e$  é denominado de tensor de elasticidade homogeneizado ou representativo do elemento de volume.

A seguir se apresentará os procedimentos e a fundamentação teórica associada ao cálculo deste tensor homogeneizado a partir de dados da micro-estrutura.

### 2.3.1 Deformação homogeneizada

Adota-se a hipótese de que a deformação macroscópica ou homogeneizada, representada por  $\boldsymbol{\varepsilon}$  em um ponto  $\mathbf{x}$  da macroescala pode ser calculada

a partir da média volumétrica das deformações na microescala,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$ , mediante a operação

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\varepsilon}_\mu(\mathbf{y}) dV \quad (2.3)$$

onde  $V_\mu$  é o volume da microescala,  $\mathbf{y}$  representa a variável de posição na microescala e  $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$  a deformação na microescala.

Restringindo nosso estudo à cinemática linearizada, o tensor de deformação infinitesimal é calculado mediante o gradiente simétrico dos deslocamentos (GURTIN, 1982; MALVERN, 1969):

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\mu \equiv \nabla^s \mathbf{u}_\mu \quad (2.4)$$

onde  $\mathbf{u}_\mu$  é o campo de deslocamentos da microescala e  $\nabla^s(\cdot)$  é o gradiente simétrico de  $(\cdot)$ , dado por

$$\nabla^s(\cdot) = \frac{1}{2} (\nabla(\cdot) + \nabla(\cdot)^T) \quad (2.5)$$

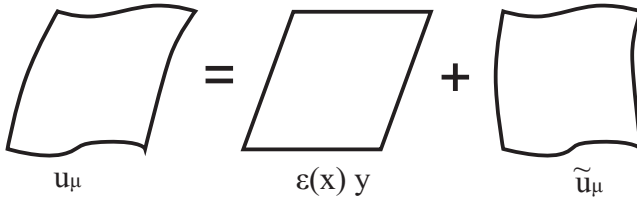
Ainda, a equação (2.3) pode ser reescrita, utilizando o teorema da divergência (MALVERN, 1969), como uma integral de uma expressão tensorial no contorno de  $\Omega_\mu$ ,  $\partial\Omega_\mu$ , resultando em

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \otimes_s \mathbf{n} dA \quad (2.6)$$

sendo  $\mathbf{n}$  o vetor unitário normal ao contorno e  $\otimes_s$  o operador tensorial simétrico definido, para dois vetores  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ , como

$$\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b} \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a}) \quad (2.7)$$





**Figura 4: Decomposição aditiva do deslocamento da microescala em duas parcelas. A primeira é proporcional à deformação macroscópica enquanto a segunda é denominada de deslocamentos flutuantes.**

### 2.3.2 Decomposição aditiva

O deslocamento microscópico é campo de deslocamentos definido no elemento representativo de volume, ou seja, na microescala. Este campo pode, em qualquer circunstância, ser dividido em duas parcelas, em forma aditiva:

$$\mathbf{u}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (2.8)$$

Nesta decomposição, a primeira parcela depende da deformação macroscópica  $\boldsymbol{\varepsilon}$  e varia linearmente com a coordenada  $\mathbf{y}$ . A segunda parcela,  $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$  é denominada de deslocamento flutuante e representa a diferença entre o valor de  $\mathbf{u}_\mu$  e a parcela linear do deslocamento,  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\mathbf{y}$ , como é mostrado na Figura 4.

O campo de deformações microscópicas pode, da mesma forma, ser decomposto em forma aditiva em uma parcela constante e outra flutuante:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (2.9)$$

Utilizando a definição (2.4), a parcela flutuante é calculada como:

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (2.10)$$

### 2.3.3 Conjuntos cinematicamente admissíveis

Define-se aqui o conjunto de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis no RVE, o conjunto dos deslocamentos que satisfazem à equação (2.6), isto é, ao conjunto  $\mathcal{K}_\mu^*$  definido como segue:

$$\mathcal{K}_\mu^* \equiv \left\{ \mathbf{v} \text{ suf. reg.} \mid \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{v} \otimes_s \mathbf{n} \, dA = \boldsymbol{\varepsilon} \right\} \quad (2.11)$$

conjunto que doravante será chamado de conjunto de deslocamento minimamente restringidos, pois na sua definição faz uso da condição mínima a ser imposta aos elementos do conjunto. A condição de regularidade suficiente (suf. reg.) é apenas para indicar que a distribuição deve ter regularidade suficiente para tornar válidas as operações de derivação e integração a seguir.

Utilizando a decomposição mostrada nas equações (2.8) e (2.9) é possível definir o conjunto dos deslocamentos microscópicos flutuantes cinematicamente admissíveis minimamente restringidos,  $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$  como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \equiv \left\{ \mathbf{v} \text{ suf. reg.} \mid \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{v} \otimes_s \mathbf{n} \, dA = 0 \right\} \quad (2.12)$$

de forma a reescrever a equação (2.11) como

$$\mathcal{K}_\mu^* = \left\{ \boldsymbol{\mu}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\mathbf{y} + \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\mu \mid \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \right\} \quad (2.13)$$

O deslocamento flutuante pode tomar valores diferentes para a mesma deformação macroscópica dependendo da condição de periodicidade (condição de contorno) utilizada no campo de deslocamentos microscópicos.

As diferentes condições de periodicidade possíveis apresentadas na Seção 2.4 acrescentam, como já dito, restrições adicionais ao conjunto  $\mathcal{K}_\mu^*$  (2.13) que permitem a identificação de soluções únicas do problema (caso contrário o problema pode não ser suficientemente determinado). Estes con-

juntos são denominados de soluções cinematicamente admissíveis reais. Enquanto  $\mathcal{K}_\mu$  é o conjunto real dos campos de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis,  $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$  é o conjunto real dos deslocamentos flutuantes cinematicamente admissíveis. Definidos de forma semelhante aos conjuntos anteriores, pode-se dizer que

$$\mathcal{K}_\mu = \left\{ \mathbf{u}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu \right\} \quad (2.14)$$

com

$$\mathcal{K}_\mu \subset \mathcal{K}_\mu^* \quad (2.15)$$

e

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \quad (2.16)$$

Além de  $\mathcal{K}_\mu$ , é necessário definir o conjunto dos deslocamentos virtuais microscópicos cinematicamente admissíveis,  $\mathcal{V}_\mu$ , de forma que

$$\mathcal{V}_\mu \equiv \left\{ \boldsymbol{\eta} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 \mid \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in \mathcal{K}_\mu \right\} \quad (2.17)$$

### 2.3.4 Equilíbrio do RVE

A condição de equilíbrio (balanço na quantidade de movimento) no RVE pode ser posta mediante o Princípio dos Trabalhos Virtuais, onde se busca a distribuição de tensores  $\boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y})$  que satisfaz a seguinte equação integral

$$\int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y}) : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}(\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\eta} dV - \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{t}^e(\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\eta} dA = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.18)$$

com  $\mathbf{t}^e$  representando as tensões externas exercidas no contorno do RVE.

Discrimina-se a seguir a integral no volume sólido e vazio da microestrutura assim como na fronteira de ambas as fases. Admitindo ausência de

tensões e forças de corpo na fase vazia, mostra-se que a expressão (2.18) se reduz à

$$\int_{\Omega_{\mu}^s} \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV - \int_{\Omega_{\mu}^s} \mathbf{b}(\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\eta} dV - \int_{\partial\Omega_{\mu}} \mathbf{t}^e(\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\eta} dA = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_{\mu} \quad (2.19)$$

A equação anterior também pode ser escrita, utilizando teorema de divergência na sua expressão forte, chegando as expressões de Euler-Lagrange definidas no domínio da microestrutura:

$$\begin{cases} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) = \mathbf{b}(\mathbf{y}) & \forall \mathbf{y} \in \Omega_{\mu}^s \\ \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) \mathbf{n} = \mathbf{t}^e & \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_{\mu} \\ \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) \mathbf{n} = \mathbf{0} & \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_{\mu}^v \end{cases} \quad (2.20)$$

### 2.3.5 Tensão homogeneizada

De forma semelhante à definição de deformação homogeneizada, escrita na equação (2.3), a tensão homogeneizada é dada pela média volumétrica do campo de tensões na microescala, ou seja

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_{\mu}} \int_{\Omega_{\mu}^s} \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) dV \quad (2.21)$$

ou, separando a integral sobre o volume ocupado por cada fase e desconsiderando as tensões na fase vazia

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_{\mu}} \int_{\Omega_{\mu}^s} \boldsymbol{\sigma}_{\mu}(\mathbf{y}) dV \quad (2.22)$$

Usando relações tensoriais pode-se, ainda, escrever a tensão homogeneizada como função das trações no contorno do RVE e de forças de corpo.

Levando em conta as equações de equilíbrio na forma forte, a simetria

do tensor  $\boldsymbol{\sigma}$  e a hipótese de que as forças de corpo atuando nos vazios são desprezíveis, pode-se escrever

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[ \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{t}^e(\mathbf{y}) \otimes_s \mathbf{y} dA - \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{b}(\mathbf{y}) \otimes_s \mathbf{y} dV \right] \quad (2.23)$$

### 2.3.6 Princípio de Hill-Mandel

O princípio de Hill-Mandel (MANDEL, 1972; HILL, 1965), postula que a potência da tensão macroscópica deve ser igual à média volumétrica da potência da tensão microscópica no RVE:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu dV \quad \forall \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.24)$$

com  $(\dot{\cdot})$  sendo a derivada temporal de  $(\cdot)$ .

É mostrado em Neto e Feijóo (2006) que tal princípio, chamado também de princípio da macro-homogeneidade, é válido se e somente se

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{t}^e \cdot \boldsymbol{\eta} dA = 0 \quad \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.25)$$

ou seja, se forem nulos os trabalhos virtuais das tensões no contorno e do campo das forças de corpo.

Substituindo este resultado na equação de equilíbrio do RVE (2.19), chega-se à expressão

$$\int_{\Omega_\mu^s} \boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y}) : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.26)$$

Considerando que as tensões em um ponto  $\mathbf{y}$  da microescala são dadas pelo modelo elástico linear, através do tensor  $\mathbf{D}_\mu$  que relaciona tensões e deformações na microescala através da relação

$$\boldsymbol{\sigma}_\mu = \mathbf{D}_\mu \boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \mathbf{D}_\mu (\boldsymbol{\varepsilon} + \nabla^s \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu) \quad (2.27)$$

que substituída em (2.26) resulta

$$\int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu : (\boldsymbol{\varepsilon} + \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu) : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.28)$$

que pode ser reescrito ainda como

$$\int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu : \boldsymbol{\varepsilon} : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = - \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu : \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu : \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \quad (2.29)$$

que mostra que o campo de deslocamentos flutuantes  $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$  é obtido como uma resposta do sistema (RVE) para que este esteja em equilíbrio com uma carga produzida pela deformação macroscópica. A equação mostra, ainda, que há uma relação linear entre a deformação macroscópica e os deslocamentos flutuantes, visto que o problema foi restringido à elasticidade linear.

### 2.3.7 O tensor de elasticidade homogeneizado

Restringindo a equação (2.22) ao problema com elasticidade linear, pode-se obter, tendo em vista (2.27)

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu (\boldsymbol{\varepsilon} + \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV \quad (2.30)$$

que, abrindo os termos da integral, se torna

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu \boldsymbol{\varepsilon} dV + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV \quad (2.31)$$

ou, ainda, como  $\boldsymbol{\varepsilon}$  é constante em todo domínio de integração

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu dV \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV \quad (2.32)$$

É possível perceber que as duas parcelas da equação (2.32) dependem linearmente de  $\boldsymbol{\varepsilon}$  (o deslocamento flutuante depende linearmente de  $\boldsymbol{\varepsilon}$  através

da equação (2.29)), o que permite escrever

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = {}^{hom}\mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.33)$$

com  ${}^{hom}\mathbf{D}$  sendo o operador constitutivo homogeneizado.

Para o caso de Taylor, onde  $\tilde{\mathbf{u}}_\mu = 0$ , a equação (2.32) se reduz à

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu dV \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.34)$$

o que permite definir

$${}^{Taylor}\mathbf{D} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu dV \quad (2.35)$$

mostrando que esta parcela nada mais é do que a média da rigidez da micro-escala.

Define-se, então,  $\tilde{\mathbf{D}}$  como sendo

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} \mathbf{D}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV \quad (2.36)$$

logo,  ${}^{hom}\mathbf{D}$  pode ser escrito como

$${}^{hom}\mathbf{D} = {}^{Taylor}\mathbf{D} + \tilde{\mathbf{D}} \quad (2.37)$$

Considerando  $\boldsymbol{\varepsilon}$  em componentes cartesianas

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \quad (2.38)$$

e seja  $\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu$  solução de

$$\int_{\Omega_\mu^s} \nabla^s \boldsymbol{\eta} : \mathbf{D}_\mu : \nabla^s \tilde{u}_{ij} dV = - \left[ \int_{\Omega_\mu^s} \nabla^s \boldsymbol{\eta} : \mathbf{D}_\mu dV \right] \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.39)$$

pode-se escrever a equação que define  $\tilde{\mathbf{D}}$  em coordenadas cartesianas como

$$\tilde{\mathbf{D}} \equiv \left[ \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^s} (D_\mu)_{ijpq} (\nabla^s \tilde{u}_{kl})_{pq} dV \right] \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (2.40)$$

Sendo assim, o problema de homogeneização torna-se calcular  ${}^{hom}\mathbf{D}$  dado pela equação (2.37) onde a primeira parcela é calculada por (2.35) e a segunda por (2.40), onde o campo de deslocamentos flutuantes é calculado por (2.39).

## 2.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições impostas sobre o espaço dos deslocamentos flutuantes admissíveis  $\mathcal{V}_\mu$  são as mínimas, mas não suficientes para tornar o problema variacional bem posto, que no presente caso significa existência de solução única. Para conseguir ter uma solução única de  $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$  é preciso adicionar condições de contorno ao RVE. Na literatura apresentam-se quatro modelos cinemáticos para estas condições de contorno que garantem periodicidade do campo de deslocamentos. Estes modelos são:

- Modelo de Taylor
- Modelo de deslocamentos lineares no contorno
- Modelo de deslocamentos periódicos no contorno
- Modelo com tensões constantes no contorno

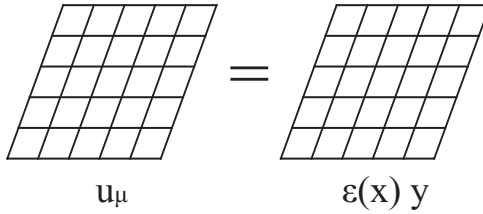
Estes modelos estão listados segundo ordem decrescente de rigidez imposta ao RVE. Segue o detalhamento de cada um dos modelos citados.

### 2.4.1 Modelo de Taylor

Também conhecido como regra das misturas, é o mais simples de todos os modelos. Nele o deslocamento flutuante é nulo:

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^s \quad (2.41)$$





**Figura 5: Campo de deslocamento arbitrário respeitando o modelo de Taylor para um domínio qualquer. Toda a deformação é homogênea de forma que a parcela flutuante não existe.**

com esta restrição imposta ao RVE, o campo  $\mathcal{V}_\mu$  fica sendo

$$\mathcal{V}_\mu = \text{Taylor} \mathcal{V}_\mu \equiv \{\mathbf{0}\} \quad (2.42)$$

e o campo de deslocamentos e de deformações na microescala toma a simples expressão:

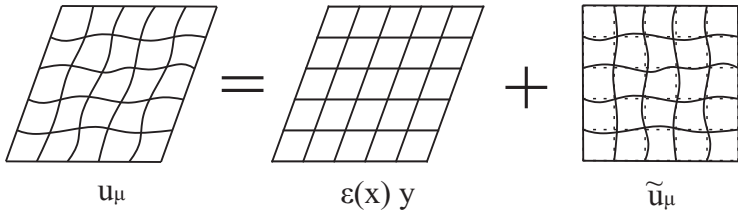
$$\mathbf{u}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \mathbf{y} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \quad (2.43)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \quad (2.44)$$

Este modelo é tido como o mais rígido entre todos os abordados pois ele impoe em todo o domínio da microescala uma deformação igual à deformação da macroescala. Desta forma o modelo ignora possíveis relações entre as diferentes fases da estrutura, fenômeno que tem um efeito crucial no resultado final da análise.

## 2.4.2 Deslocamentos lineares no contorno

Conhecido em inglês como *linear boundary displacement*, este modelo será denotado neste trabalho por LBD. Segundo ele, os deslocamentos no contorno do RVE são nulos. Tal imposição cinemática no campo de deslocamentos é escrita como



**Figura 6: Decomposição aditiva de um campo de deslocamento arbitrário com a imposição de deslocamentos lineares no contorno. Esta classe tem deslocamentos flutuantes nulos no contorno, de forma que o único deslocamento nesta região é o da parcela homogênea.**

$$\tilde{\mathbf{u}}_{\mu} = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \delta\Omega_{\mu} \quad (2.45)$$

o que torna a equação (2.8)

$$\mathbf{u}_{\mu} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\mathbf{y} \quad \forall \mathbf{y} \in \delta\Omega_{\mu} \quad (2.46)$$

e o espaço dos deslocamentos admissíveis

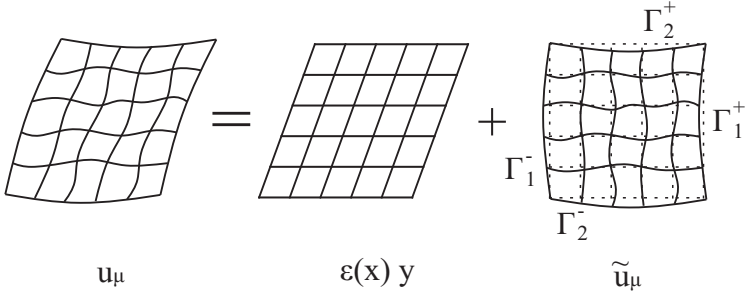
$$\mathcal{V}_{\mu} = {}^{\text{LBD}}\mathcal{V}_{\mu} \equiv \{\mathbf{0}\} \quad \forall \mathbf{y} \in \delta\Omega_{\mu} \quad (2.47)$$

A Figura 6 mostra a decomposição aditiva de um campo de deslocamentos arbitrário em um domínio. Nela, é possível notar como o campo de deslocamentos deve ser linear no contorno e o campo de deslocamentos flutuantes tem deslocamentos nulos nessa região pois a parcela linear cumpre essa premissa.

### 2.4.3 Deslocamentos flutuantes periódicos no contorno

Este modelo permite deslocamentos flutuantes no contorno, impondo apenas periodicidade dos mesmos no RVE.

Para ilustrar este caso, considere-se o RVE da Figura 7, que apresenta



**Figura 7: Campo de deslocamento arbitrário da classe PBC decomposto aditivamente. No contorno da parcela flutuante são impostas condições para que pares de nós localizados em arestas opostas tenham o mesmo deslocamento, garantindo assim a periodicidade da solução.**

pares de contornos (arestas, no caso 2D mostrado na figura) com normais opostas. Neste caso, chama-se de  $\Gamma_1^-$  e  $\Gamma_1^+$  às arestas inicialmente verticais e  $\Gamma_2^-$  e  $\Gamma_2^+$  às arestas horizontais. De forma geral, cada ponto  $\mathbf{y}^+$  na aresta  $\Gamma_i^+$  tem um ponto  $\mathbf{y}^-$  na aresta  $\Gamma_i^-$ . A imposição cinemática deste modelo indica que cada um desses pares de pontos deverá ter o mesmo valor de deslocamento flutuante, ou seja

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ pares } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \quad (2.48)$$

Esta imposição garante que o campo de deslocamento se comporte de maneira periódica, de forma menos restritiva que as outras duas. Assim, o espaço dos deslocamentos admissíveis se torna

$$\mathcal{V}_\mu = \text{PBC} \mathcal{V}_\mu \equiv \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \mid \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+, t) = \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-, t) \quad \forall \text{ pares } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \right\} \quad (2.49)$$

#### 2.4.4 Tensões constantes no contorno

Diferentemente dos três modelos anteriores, este modelo denotado como UBT (sigla para *uniform boundary traction*), não faz imposição direta-

mente ao campo de deslocamentos, mas sim ao campo de tensões da seguinte forma:

$$\mathbf{t}^e(\mathbf{y}) = \boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y})\mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \quad (2.50)$$

Como não há restrições no campo de deslocamentos, o espaço de deslocamentos admissíveis  $\mathcal{V}_\mu$  é, simplesmente

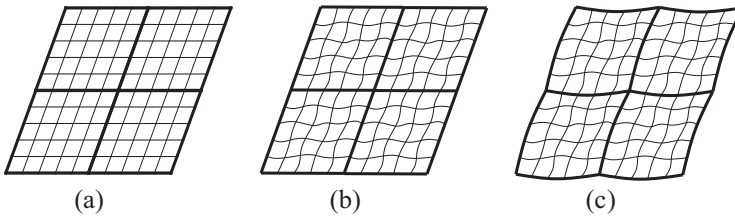
$$\mathcal{V}_\mu = {}^{UBT}\mathcal{V}_\mu \equiv \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \quad (2.51)$$

A imposição das diferentes classes de periodicidade vão gerar diferentes valores para as propriedades homogeneizadas. Pode-se perceber que a parcela homogênea dos deslocamentos possui, por construção, periodicidade no contorno. Assim, as três primeiras classes apresentadas, Taylor, LBD e PBC, têm deslocamentos periódicos no contorno, sendo que a terceira tem deslocamentos flutuantes não nulos em, ao menos, um ponto do contorno.

Esta constatação mostra também que os domínios de resposta mais rígidos são, na verdade, subdomínios dos menos rígidos, ou seja

$${}^{Taylor}\mathcal{V}_\mu \subset {}^{LBD}\mathcal{V}_\mu \subset {}^{PBC}\mathcal{V}_\mu \subset {}^{UBT}\mathcal{V}_\mu \quad (2.52)$$

Como o domínio analisado seria uma parcela finita da microestrutura do material, esta deveria estar cercada de outras partes semelhantes, que formaria o meio contínuo. A Figura 8 mostra como as três diferentes classes garantem que essa condição seja obedecida.



**Figura 8:** Repetição de um RVE com condições de contorno de Taylor (a), com deslocamentos lineares no contorno (b) e deslocamentos flutuantes periódicos no contorno (c). A imposição das diferentes condições de contorno garantem que a micro estrutura (delimitada pelas linhas espessas) se "encaixem" com a outras semelhantes, garantindo a formação de um meio com campo de deslocamentos contínuo.

### 3 IMPLEMENTAÇÃO

#### 3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

A formulação utilizada nas condições de contorno são baseadas na escolha dos espaços  $\mathcal{V}_\mu$  apropriados que limitam a parcela flutuante dos deslocamentos no RVE, conforme já descrito em 2.4. Foram apresentados quatro diferentes modelos, são eles: de Taylor; deslocamentos lineares no contorno (LBD); deslocamentos flutuantes periódicos no contorno (PBC); e tensões uniformes no contorno (UBT).

O modelo de Taylor é considerado a aproximação mais simples e menos precisa dos quatro, por isso não será utilizado nas análises realizadas. Os outros três modelos foram implementados e utilizados para a obtenção de propriedades efetivas de amostras de rochas.

Descreve-se a seguir o tratamento dado a cada um dos três modelos cinemáticos apresentados anteriormente de maneira a facilitar sua implementação num programa comercial. Isto será feito utilizando as definições dos campos de deslocamentos flutuantes e virtuais cinematicamente admissíveis de cada modelo para caracterizar as condições de contorno a serem aplicadas no elemento representativo de volume.

O procedimento de homogeneização apresentado na Seção 2.3 mostra que a matriz constitutiva homogênea pode ser descrita pela soma de uma parcela denominada parcela de Taylor e da parcela flutuante. A mesma operação será feita aqui, porém de uma maneira alternativa que considera ambas as parcelas simultaneamente, reduzindo assim o número de operações e, principalmente, facilitando a incorporação de condições de contorno quando a análise do RVE é feita com um programa comercial.

### 3.1.1 Deslocamentos lineares no contorno

Neste modelo, o campo de deslocamentos flutuantes e virtuais é dado pela equação (2.47)

$${}^{LBD}V_\mu \equiv \{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \mid \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\tilde{\Omega}_\mu \}$$

fazendo com que o deslocamento no contorno do RVE possa ser escrito como

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}, t) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) \mathbf{y} \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\tilde{\Omega}_\mu \quad (3.1)$$

ou em componentes como

$$u_q = \varepsilon_{qr} y_r \quad (3.2)$$

sendo  $q = 1, 2, 3$  a direção coordenada.

Tanto (3.1) como (3.2) indicam que os deslocamentos no contorno são linearmente dependentes da deformação homogeneizada e da coordenada do ponto.

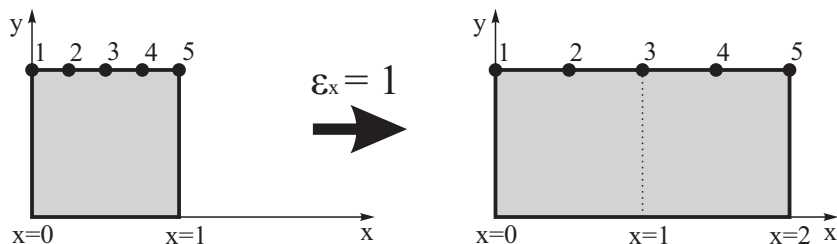
A Figura 9 ilustra o caso de um RVE unitário. Considerando uma deformação  $\boldsymbol{\varepsilon}_{xx}$  como mostrada em (3.3), o deslocamento a ser imposto nos nós  $j$  localizados no contorno superior do RVE são dados pela expressão da equação (3.4)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{u}^j = [u_x^j \ 0 \ 0]^T \quad (3.4)$$

onde  $u_x^j$  toma o valor dado na Tabela 1 segundo o nó  $j$  considerado.

Como consequência de esta ser uma operação linear, todos os nós com a mesma coordenada em uma das direções terão, como condição de contorno,



**Figura 9:** RVE na configuração original, à esquerda, e na configuração deformada, à direita, após a aplicação de uma deformação normal unitária na direção  $x$ . Os nós mostrados na aresta superior estão igualmente espaçados e mantém esta característica após a deformação.

Nó	1	2	3	4	5
Deslocamento	0	0.25	0.50	0.75	1

**Tabela 1:** Deslocamentos a serem aplicados nos nós da geometria indicada na Figura 9 a fim de aplicar a condição de contorno de deslocamentos lineares no contorno.

o mesmo deslocamento a ser aplicado nesta direção. Por exemplo, na Figura 9, todos os nós inicialmente na coordenada  $x = 1$  terão como condição de contorno um deslocamento de 1 em  $x$ , ficando na configuração final em  $x = 2$ .

A aplicação do passo de carga para os casos de cisalhamento é feita utilizando uma matriz de deformação com componentes simétricas. Um exemplo, para uma deformação unitária nas direções 1 e 2, é mostrado na equação que segue

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$



### 3.1.2 Deslocamentos periódicos no contorno

Neste modelo, o conjunto de deslocamentos flutuantes e virtuais é dado pela equação (2.49), repetida abaixo

$${}^{\text{PBC}}\mathcal{V}_\mu \equiv \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \mid \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+, t) = \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-, t) \quad \forall \text{ pares } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \right\} \in \partial\Omega_\mu$$

Considerando que o campo de deslocamentos admissível é sempre dado pela contribuição das parcelas linear e flutuante, isto é

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}, t) = \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}, t) \quad (3.6)$$

se tem que os deslocamentos flutuantes em pontos opostos do contorno podem ser escritos como

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+, t) = \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^+, t) - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}^+ \quad (3.7)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-, t) = \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^-, t) - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}^- \quad (3.8)$$

Como estes valores devem ser iguais, obtém-se, após breve arranjo, a seguinte restrição a ser aplicada nos deslocamentos totais de nós opostos de contorno:

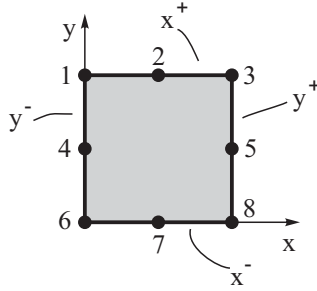
$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^+, t) - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}^+ = \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^-, t) - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}^- \quad (3.9)$$

onde os valores de deslocamentos  $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^+, t)$  e  $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^-, t)$  são desconhecidos ao passo que a coordenada dos pontos,  $\mathbf{y}^+$  e  $\mathbf{y}^-$ , e a deformação  $\boldsymbol{\varepsilon}$  são conhecidas.

Separando as incónigas de um lado da igualdade e os valores conhecidos de outro, a equação anterior é reescrita como

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^+) - \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}^-) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y}^+ - \mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ pares } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \in \partial\Omega_\mu \quad (3.10)$$

A Figura 10 mostra um exemplo de RVE plano com oito nós no contorno. As arestas do RVE (um quadrado) são nomeadas baseadas na sua



**Figura 10: RVE fictício com nós nas arestas, nos quais serão aplicadas condições de contorno de periodicidade.**

direção com sub índice 1 se paralelo à  $x$  e 2 se paralelo à  $y$ , com um supra índice que é '-' se a aresta é coincidente a um eixo e '+' caso o contrário. Desta forma tem-se dois pares de arestas paralelas,  $\{\Lambda_1^-, \Lambda_1^+\}$  e  $\{\Lambda_2^-, \Lambda_2^+\}$ . A Tabela 2 mostra os nós que correspondem a cada aresta.

Contorno	Nós		
$\Lambda_2^-$	1	4	6
$\Lambda_2^+$	3	5	8
$\Lambda_1^-$	6	7	8
$\Lambda_1^+$	1	2	3

**Tabela 2: Nós pertencentes a cada aresta conforme representado na Figura 10. Cada nó está em coluna equivalente ao seu par na aresta oposta, como por exemplo nós 1 e 3 nas arestas  $\Lambda_2^-$  e  $\Lambda_2^+$ , respectivamente.**

Nota-se neste caso, que cada um dos vértices (pontos 1, 3, 6 e 8) estão presentes em duas arestas de maneira que seus deslocamentos flutuantes respeitam as seguintes equações:

$${}^1\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^3\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.11)$$

$${}^1\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^6\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.12)$$

$${}^8\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^3\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.13)$$

$${}^8\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^6\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.14)$$

ou equivalentemente,

$${}^1\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^3\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^6\tilde{\mathbf{u}}_\mu = {}^8\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.15)$$

Em outras palavras, o deslocamento flutuante nos vértices é igual a uma constante, que, sem perda de generalidade, é arbitrada nula. Assim, o deslocamento dos vertices é dado exclusivamente pela parcela linear definida pelo tensor de deformação homogeneizado.

Caso similar ocorre num RVE em 3D, onde o valor de deslocamento dos vértices é definido pela parcela linear enquanto o resto dos nós de contorno estão sujeitos a restrição de periodicidade (3.10).

Em Li e Wongsto (2004) é possível encontrar um método para implementação destas condições que já leva este efeito em consideração.

### 3.1.3 Tensões constantes no contorno

Nesta classe cinemática, as restrições não são explícitas em termos de deslocamentos, de maneira que os campos de deslocamentos microscópicos flutuantes e virtuais cinematicamente admissíveis são, conforme mostrado na equação (2.51)

$${}^{UBT}\mathcal{V}_\mu = \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$$

Os deslocamentos microscópicos,  $\mathbf{u}_\mu$  devem satisfazer a equação (2.6), re-escrita abaixo, provenientes da relação intrínseca entre a deformação macroscópica e o deslocamento no RVE:

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \otimes \mathbf{n} \, d\partial\Omega_\mu = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} V_\mu$$

Para mostrar de forma mais didática como essa equação gerará condições de contorno possíveis de serem aplicados no RVE, mostra-se na

Figura 10 um exemplo utilizando um RVE em 2D. Neste caso o contorno pode ser dividida em quatro conjuntos:

$$\Gamma_1^+ \equiv \{ \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \mid \mathbf{n}(\mathbf{y}) = [ 1 \ 0 ]^T \} \quad (3.16a)$$

$$\Gamma_1^- \equiv \{ \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \mid \mathbf{n}(\mathbf{y}) = [ -1 \ 0 ]^T \} \quad (3.16b)$$

$$\Gamma_2^+ \equiv \{ \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \mid \mathbf{n}(\mathbf{y}) = [ 0 \ 1 ]^T \} \quad (3.16c)$$

$$\Gamma_2^- \equiv \{ \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \mid \mathbf{n}(\mathbf{y}) = [ 0 \ -1 ]^T \} \quad (3.16d)$$

de forma tal que

$$\partial\Omega_\mu = \Gamma_1^+ \cup \Gamma_1^- \cup \Gamma_2^+ \cup \Gamma_2^- \quad (3.17)$$

o que permite que a integral da equação (2.6) seja dividida em quatro integrais, cada uma com um domínio de integração diferente

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_1^+} \mathbf{u} \otimes [ 1 \ 0 ]^T d\Gamma_1^+ + \int_{\Gamma_1^-} \mathbf{u} \otimes [ -1 \ 0 ]^T d\Gamma_1^- + \\ & \int_{\Gamma_2^+} \mathbf{u} \otimes [ 0 \ 1 ]^T d\Gamma_2^+ + \int_{\Gamma_2^-} \mathbf{u} \otimes [ 0 \ -1 ]^T d\Gamma_2^- = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} V_\mu \end{aligned} \quad (3.18)$$

Chamando de  $u_x$  e  $u_y$ , respectivamente, as componentes do vetor  $\mathbf{u}_\mu$  nas direções x e y e aplicando o produto tensorial indicado, a equação anterior resulta

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_x^+} \begin{bmatrix} u_x & 0 \\ u_y & 0 \end{bmatrix} d\Gamma_x^+ - \int_{\Gamma_x^-} \begin{bmatrix} u_x & 0 \\ u_y & 0 \end{bmatrix} d\Gamma_x^- + \\ & \int_{\Gamma_y^+} \begin{bmatrix} 0 & u_x \\ 0 & u_y \end{bmatrix} d\Gamma_y^+ - \int_{\Gamma_y^-} \begin{bmatrix} 0 & u_x \\ 0 & u_y \end{bmatrix} d\Gamma_y^- = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{bmatrix} V_\mu \end{aligned} \quad (3.19)$$

equação que pode, por sua vez, ser dividida em outras quatro, uma para cada componente tensorial. Isso feito para o primeiro termo, resulta, eliminando

os termos nulos

$$\int_{\Gamma_x^+} u_x d\Gamma_x^+ - \int_{\Gamma_x^-} u_x d\Gamma_x^- = \varepsilon_{xx} V_\mu \quad (3.20)$$

As componentes da equação (3.19) pode, ainda, ser escrita de maneira indicial como

$$\int_{\Gamma_j^+} u_i d\Gamma_j^+ - \int_{\Gamma_j^-} u_i d\Gamma_j^- = \varepsilon_{ij} V_\mu \quad (3.21)$$

onde se mostra que a diferença das integrais do campo de deslocamentos em um par de contorno é proporcional à deformação imposta. Esta é a equação que permite a imposição da condição de tensões uniformes no contorno.

Esta operação pode ser realizada mediante integração numérica, utilizando pontos de integração e pesos correspondentes. Uma forma simples e viável de implementação é utilizar a coordenada dos nós como pontos de integração, avaliando nestes os valores de deslocamento e tomar como pesos de integração os setores de área (ou segmentos) de contorno vinculado ao nó. Sendo  $N^+$  e  $N^-$  o número de nós em cada aresta do par e  $a_k$  o peso do  $k$ -ésimo nó na integração (superfície ou comprimento equivalente do nó), a equação (3.20) é escrita na forma discreta como

$$\sum_{k=1}^{N^+} a_k u_x^k - \sum_{k=1}^{N^-} a_k u_x^k = \varepsilon_{xx} V_\mu \quad (3.22)$$

equação que é utilizada para gerar as condições de contorno para todos os pares de contornos.

Por questão de simplicidade, o exemplo foi feito para o caso 2D, porém esta abordagem pode ser usada sem quaisquer dificuldades ou nuances adicionais para um caso 3D.

### 3.2 DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS A PARTIR DA MATRIZ ANISOTRÓPICA

A operação de homogeneização acima apresentada fornece uma matriz constitutiva do material que depende das características microestruturais e, em termos gerais, é anisotrópica.

Entretanto, um dos objetivos deste trabalho é a identificação de um módulo volumétrico  $K$  e um módulo de cisalhamento  $G$  que representem o material e permitam o cálculo de velocidade de onda volumétrica e cisalhante. Estas propriedades correspondem a um material isotrópico. Assim, para o cálculo destes coeficientes, optou-se por encontrar a matriz isotrópica mais próxima da matriz obtida através do processo de homogeneização. Para tal utilizou-se um processo de minimização de uma norma que quantifica a diferença entre as duas matrizes, anisotrópica e isotrópica.

Os coeficientes de uma matriz elástica isotrópica dependem de  $K$  e  $G$  segundo a expressão

$$\mathbf{C}^{iso} = \begin{bmatrix} C_1 & C_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ & C_1 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & C_1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_3 & 0 & 0 \\ & & & & C_3 & 0 \\ sim & & & & & C_3 \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

onde  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  assumem os valores dados nas equações que seguem:

$$C_1 = K + \frac{4G}{3} \quad (3.24)$$

$$C_2 = K - \frac{2G}{3} \quad (3.25)$$

$$C_3 = G \quad (3.26)$$

Por outro lado, a matriz anisotrópica resultante do processo de homogeneização é dada genericamente por

$$\mathbf{C}^{aniso} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ sim & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

O processo de mínimo é realizado através da operação

$$\min_{G,K} D(G, K) \quad (3.28)$$

onde

$$D(G, K) = \sum_i \sum_j (C_{ij}^{aniso} - C_{ij}^{iso})^2 \quad (3.29)$$

assim os valores  $G$ , módulo de cisalhamento, e  $K$ , módulo volumétrico, minimizadores do problema acima, serão os coeficientes homogeneizados da amostra.

O módulo de cisalhamento é definido como a razão entre a tensão de cisalhamento e a deformação de cisalhamento (LERNER, 1996)

$$G \equiv \frac{\tau_{xy}}{\gamma_{xy}} \quad (3.30)$$

com  $\tau_{xy}$  sendo a tensão cisalhante e  $\gamma_{xy}$  a deformação cisalhante.

O módulo volumétrico é definido como a razão entre a pressão aplicada e a deformação relativa do material. Em outras palavras, é uma constante que descreve como um sólido ou fluido tende a se deformar em todas as direções quando encontra-se carregado hidrosticamente (BAUER *et al.*, 2013)

$$K \equiv -V \frac{\partial P}{\partial V} \quad (3.31)$$

onde  $V$  é o volume da amostra e  $P$  é a pressão aplicada.

Valores típicos destas propriedades para arenitos (rochas analisadas neste trabalho, veja Capítulo 4) encontrados em trabalhos disponíveis na literatura (ANDRÄ *et al.*, 2013b) são de 19 a 23 GPa para o módulo de cisalhamento e de 18 a 20 GPa para o módulo volumétrico. Os valores variam em função dos diferentes métodos usados para obtenção dos resultados.





## 4 RESULTADOS

### 4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

São apresentados no presente capítulo as considerações e os resultados de alguns dos estudos feitas utilizando o modelo desenvolvido ao longo do trabalho.

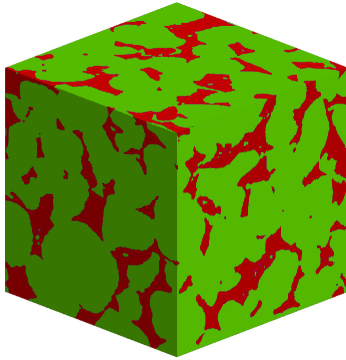
#### 4.1.1 Geometrias

Os estudos aqui presentes são fruto do tratamento de duas amostras rochosas (arenitos) diferentes, digitalizadas através de microtomografias, chamadas aqui de MP1 e MP2.

A microtomografia MP1 fornece uma amostra com  $300^3$  voxels, mostrada na Figura 11. Em 11a tem-se uma imagem 3D da geometria completa e em 11b tem-se uma representação da um recorte do interior da amostra, no qual é possível observar a complexa estrutura porosa presente neste tipo de rocha. Nesta microtomografia, cada voxel representa um cubo de  $4,6 \mu m$  de aresta, fazendo com que a amostra total seja um cubo com  $1380 \mu m$  de aresta. Esta geometria será tratada no que segue como MP1 300, devido ao nome da microtomografia da qual ela provem e do número de voxels em cada aresta.

A microtomografia MP2 fornece uma representação da amostra rochosa com  $600^3$  voxels. Dela, duas geometrias são geradas: uma da amostra completa, com 600 voxels por aresta, e outra com 300 voxels por aresta, que é uma sub-amostra da primeira. Estas geometrias serão chamadas, respectivamente, de MP2 600 e MP2 300. Nesta microtomografia, cada voxel representa um cubo de  $5,6 \mu m$  de aresta, de forma que as geometrias sejam cubos com 3360 e  $1680 \mu m$  de aresta.

Uma representação 3D da geometria MP2 300 é mostrada na Figura

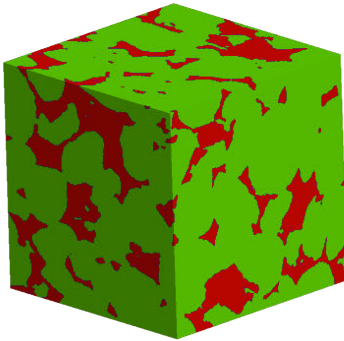


(a) Geometria

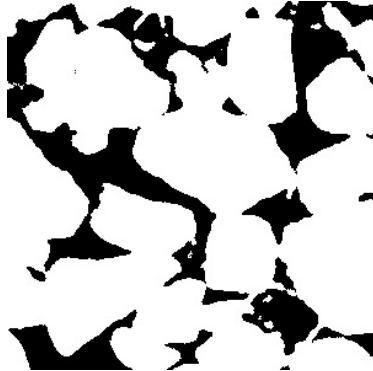


(b) Recorte da geometria

Figura 11: Imagem da geometria MP1 300. Obtida através de microtomografia, ela é representada por  $300^3$  voxels, com cada voxel tendo  $4,6 \mu\text{m}$  de aresta. Verde e branco representam os grãos enquanto vermelho e preto representam poros.



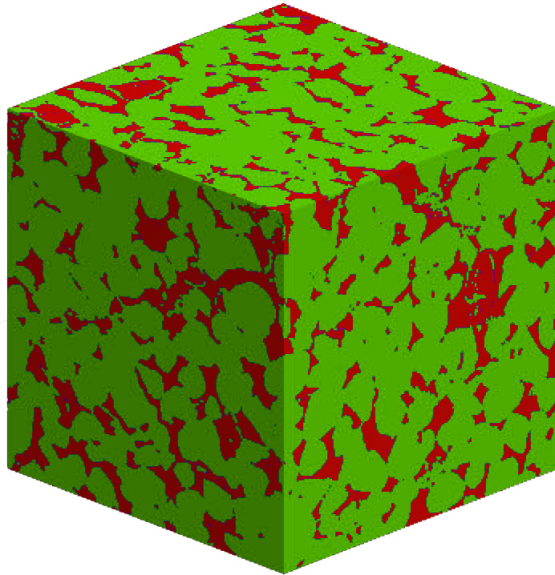
(a) Geometria



(b) Recorte da geometria

Figura 12: Imagem da geometria MP2 300. Obtida através de microtomografia, ela é representada por  $300^3$  voxels, com cada voxel tendo  $5,6 \mu\text{m}$  de aresta. Verde e branco representam os grãos enquanto vermelho e preto representam poros.

12a e um recorte da mesma na Figura 12b. A geometria MP2 600 é mostrada em 3D na Figura 13.



**Figura 13: Imagem da geometria MP2 600. Obtida através de microtomografia, ela é representada por  $600^3$  voxels, com cada voxel tendo  $5,6 \mu\text{m}$  de aresta. Verde representa os grãos enquanto vermelho representa poros.**

#### **4.1.2 Propriedades materiais**

Para estimar as propriedades elásticas efetivas das rochas mostradas na seção anterior utilizou-se propriedades materiais que representam arenitos.

O principal constituinte desse tipo de rocha é o quartzo, havendo outros mineirais, em menor escala, como calcita e dolomita.

É mostrado na literatura (ARNS *et al.*, 2007) que pode-se representar a fase sólida das rochas areníticas apenas com as propriedades mecânicas do quartzo e obter boa concordância com resultados experimentais. Desta forma, se adotou essa abordagem. Os vazios são representados por elementos com propriedades de rigidez iguais a  $1 \times 10^{-2}$  (equivalente a aproximadamente  $\frac{1}{4000}$  do módulos de rigidez do arenito). Desta maneira representa-se os vazios e

Densidade	1, quartzo	0,75	0,50	0,25	0, vazio
K [GPa]	37	15,61	1,95	0,03	0,01
G [GPa]	44	18,56	2,32	0,04	0,01

**Tabela 3: Propriedades materiais utilizadas nas homogeneizações realizadas. Valores retirados de Andrä *et al.* (2013b). Propriedades para densidades intermediárias calculadas segundo equação (4.1).**

se evita o aparecimento de singularidades na solução do sistema linear. .

As propriedades utilizadas para o quartzo são mostradas na Tabela 3.

### 4.1.3 Redução do número de voxels da geometria

Devido a limitações computacionais, as simulações não puderam ser realizadas contando com número de voxels total das geometrias obtidas por microtomografia ( $300^3$  e  $600^3$ ). Para contornar tal limitação, foi feito um tratamento para reduzir o número de voxels utilizados na representação da estrutura rochosa.

O algoritmo criado recebe como dados de entrada a geometria original (a qual se deseja reduzir) em forma de voxels e a quantidade de elementos finitos hexaédricos com que se deseja realizar a análise e operação de homogeneização. Como o número de elementos da nova geometria é menor do que a original, existirão diversos voxels ocupando o espaço que será, posteriormente, ocupado por um único elemento. Cada voxel das geometrias provenientes das microtomografias tem associado a si uma propriedade material indicada como 0 se vazio ou 1 se sólido. Caso o elemento finito esteja composto apenas por voxels sólidos, será adotado para este elemento a propriedade do quartzo. Se, pelo contrário, for composto apenas por voxels vazios, a propriedade deste será vinculada a um material suficientemente flexível.

A dificuldade surge quando um elemento finito ocupa uma região do contorno dos poros, contendo voxels sólidos e vazios. Algumas alternati-

vas podem ser adotadas neste caso. Para este trabalho, foram testadas duas soluções. A primeira é atribuir a propriedade sólido se a função da fração de volume entre sólido e vazio (densidade) existente neste elemento for maior que 50% e vazio caso contrário. A segunda é atribuir uma propriedade intermediária (fases) para este elemento, proporcional à fração de volume mencionada.

Em homogeneização é frequente a utilização de leis que relacionam as propriedades mecânicas do material com a sua fração de volume (doravante chamada de densidade),  $\rho$ , do tipo (HASSANI; HINTON, 1999)

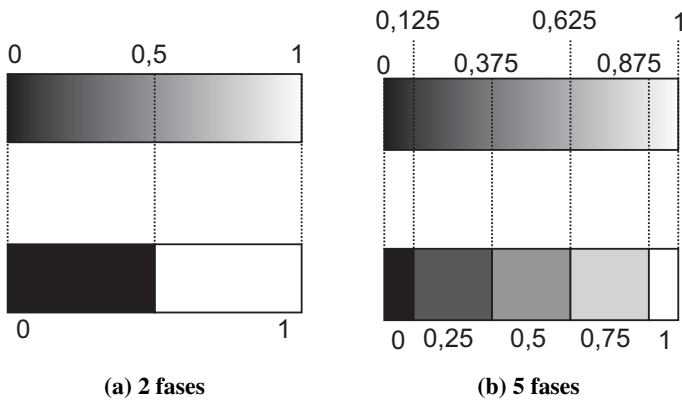
$$K_\rho = \rho^3 K_{\text{quartzo}} \qquad G_\rho = \rho^3 G_{\text{quartzo}} \qquad (4.1)$$

Escolheu-se, neste trabalho, criar três fases intermediárias entre a matriz (sólido) e os vazios, representando densidades de 25, 50 e 75%. A fase do material é aquela que a média da densidade calculada pelo algoritmo está mais perto do valor correspondente à fase.

Uma esquematização do processo de definição da densidade dos elementos é mostrada nas Figuras 14a e 14b. Comparações entre estes dois diferentes métodos foram realizados e são mostrados neste capítulo. Eles serão chamados de '2 fases' e '5 fases'.

#### 4.2 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA EM RELAÇÃO AO TAMANHO DO RVE CONSIDERANDO A PERIODICIDADE DA MICROESTRUTURA

O objetivo deste estudo é verificar, para uma dada resolução fixa de descrição da geometria (isto é, para um mesmo número de voxels num único elemento finito), como se comporta a solução da homogeneização com o aumento do tamanho do RVE. Para tal estudo, escolheu-se arbitrariamente um



**Figura 14: Ilustração do algoritmo usado para a definição das propriedades materiais aplicadas nos elementos em função da fração de volume.**

padrão, obtido através de um tratamento na geometria original MP1 300 e foram simuladas três células geradas pela repetição linear deste padrão.

As geometrias são mostradas na Figura 15. Na primeira, Figura 15a, é mostrado o padrão escolhido. Para a geração dessa geometria, uma amostra de  $100^3$  elementos foi retirada da geometria original e, reduzindo para  $30^3$  elementos finitos, utilizando o procedimento descrito na seção anterior com duas fases. Nas figuras 15b e 15c se ilustram as outras duas geometrias utilizadas neste estudo, geradas pela repetição linear da malha da Figura 15a em cada direção, resultando em geometrias com  $60^3$  e  $90^3$  elementos finitos, respectivamente.

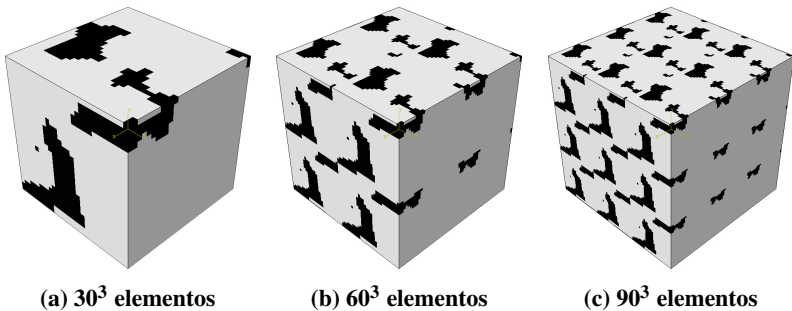
As figuras 16 e 17 mostram os resultados obtidos nas análises. A primeira mostra o módulo volumétrico homogeneizado,  $K$ , enquanto a segunda mostra o módulo de cisalhamento,  $G$ . Observando os gráficos, é possível notar que os valores das duas propriedades obtidos com a condição de deslocamentos periódicos no contorno (PBC) se mantém praticamente constantes, com  $K \approx 27GPa$  e  $G \approx 30GPa$ . As simulações utilizando as duas outras condições apresentaram valores qualitativamente esperados, com UBT ficando abaixo

(menos rígido) dos valores de PBC e LBD acima (mais rígido) dos dois.

Percebe-se que os valores das análises com tensões constantes no contorno ficaram bem mais distantes da curva PBC do que o modelo com deslocamentos lineares no contorno. As propriedades elásticas efetivas com LBD para três repetições ficaram em  $K \approx 28GPa$  e  $G \approx 31GPa$ , uma diferença na ordem de 3%. Já os valores com UBT,  $K \approx 18GPa$  e  $G \approx 23GPa$ , representando uma diferença percentual de 33% e 25%, respectivamente, quando comparados com aqueles obtidos utilizando a condição PBC.

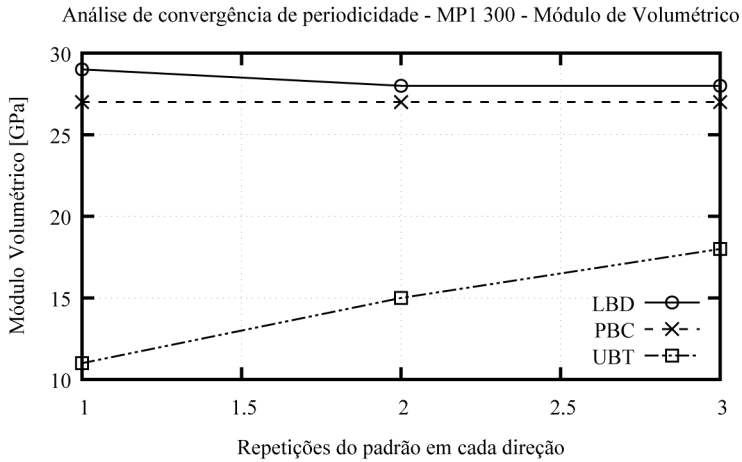
As curvas de convergência mostram, assim, o comportamento esperado: mantendo a mesma resolução de representação geométrica da microestrutura, ao aumentar o tamanho de repetições da microestrutura no RVE há uma tendência à convergência dos valores homogeneizados, sendo que o LBD fornece um limite superior enquanto o UBT fornece um limite inferior

Além disto, mostra que para tais casos, onde a microestrutura pode ser descrita pela repetição de um padrão regular, a condição PBC é a mais indicada para a obtenção de propriedades efetivas.

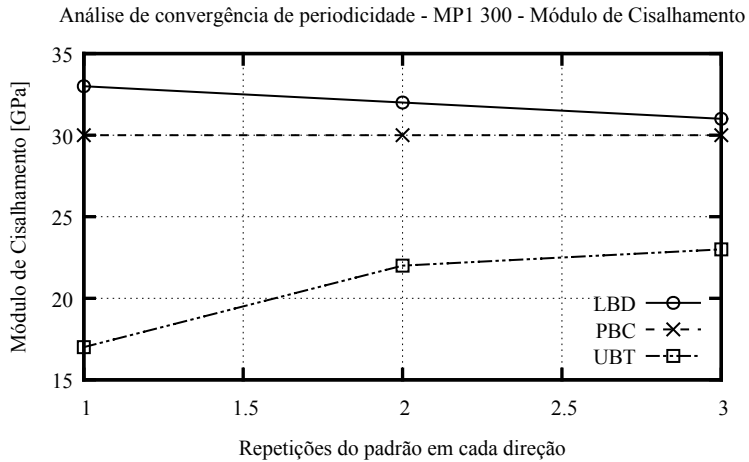


**Figura 15:** Geometrias geradas utilizando o método descrito no estudo 4.2. As geometrias são criadas pela repetição linear do mesmo padrão, apresentado em (a).





**Figura 16: Módulo volumétrico homogeneizado obtido utilizando 1, 2 e 3 repetições lineares da microestrutura básica, para as três condições de contorno diferentes.**



**Figura 17: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido utilizando 1, 2 e 3 repetições lineares da microestrutura básica, para as três condições de contorno diferentes.**

#### 4.3 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA EM RELAÇÃO AO TAMANHO DO RVE CONSIDERANDO MICROSTRUTURA NÃO PERIÓDICA (ROCHA)

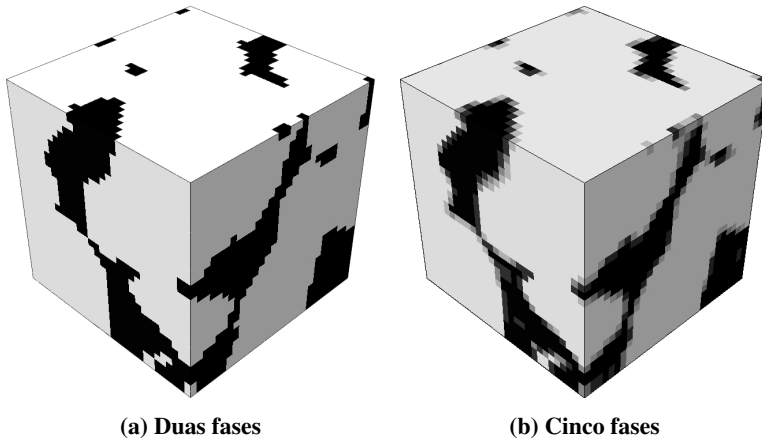
O objetivo deste estudo é observar a variação que ocorre nos resultados obtidos utilizando diferentes tamanhos de RVE, mas agora sendo tratados com microestruturas representativas de amostras de rocha. Neste caso, o aumento do RVE não envolverá uma repetição da microestrutura como no caso anterior. Os RVEs foram construídos utilizando as geometrias de MP1 300 e MP2 300.

Como a microtomografia MP1 tem cada voxel representando  $4,6 \mu\text{m}$  de aresta, o tamanho da aresta da geometria com  $100^3$  é  $460 \mu\text{m}$ , de  $200^3$  é  $920 \mu\text{m}$  e de  $300^3$  é  $1380 \mu\text{m}$ . Já para MP2, na qual cada voxel representa  $5,6 \mu\text{m}$ , os volumes tem arestas de  $560 \mu\text{m}$ ,  $1120 \mu\text{m}$  e  $1680 \mu\text{m}$ .

De forma a viabilizar a análise de Elementos Finitos, cada um destes RVE teve o seu número de elementos reduzido, cuidando para que a resolução dos elementos finitos seja mantida em cada caso, de maneira a representar igualmente as características geométricas da microestrutura. Assim, os RVEs de  $100^3$  foram reduzidos para  $30^3$ , os RVEs de  $200^3$  foram reduzidos para  $60^3$  e, finalmente, os RVEs de  $300^3$  foram reduzidos para  $90^3$  elementos finitos.

Ressalta-se que a redução feita nas três geometrias obedece a mesma proporção, de dez voxels na geometria original para três na reduzida fazendo com que cada elemento finito represente o mesmo volume em todas as três geometrias. Busca-se com isto que todas as análises sejam realizadas com malhas de elementos finitos que representem a geometria da microestrutura com a mesma resolução, isolando esta variável das comparações.

Por outro lado, sabendo a priori que a geometria irregular dos poros na microestrutura tem influência nos resultados de homogeneização quando representada em forma pobre, foram feitas comparações utilizando 2 e 5 fases



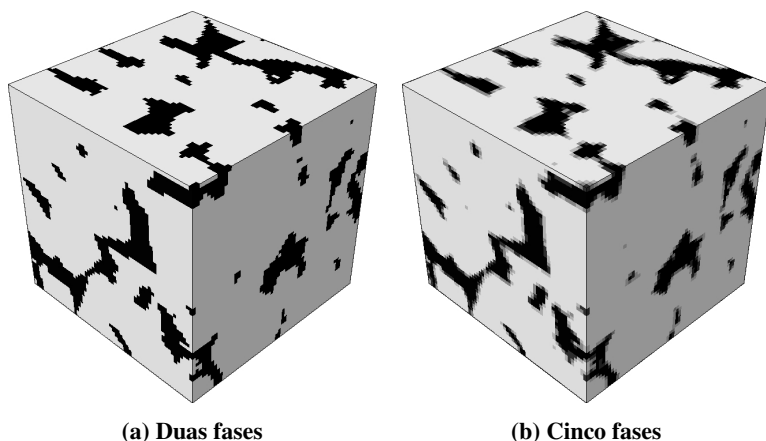
**Figura 18:** Amostra de  $100^3$  voxels discretizada com  $30^3$  elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com  $460 \mu\text{m}$  de aresta.

de material para aqueles elementos que possuem intersecção com o contorno da microestrutura.

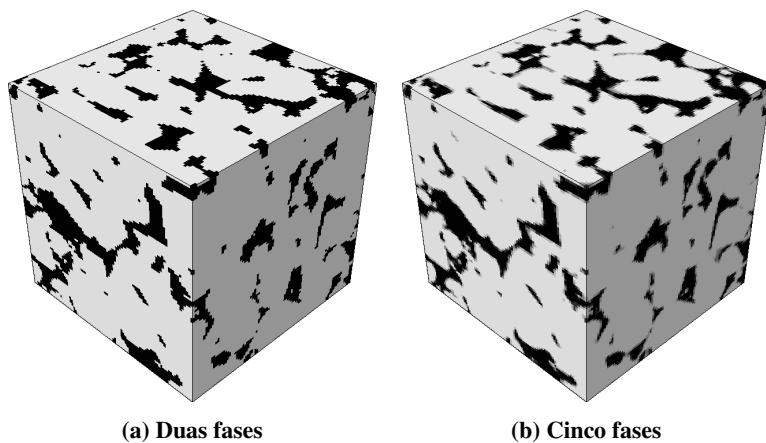
#### 4.3.1 RVEs baseados em MP1 300

As geometrias geradas para este estudo são mostradas nas figuras 18a e 18b, respectivamente, as geometrias com  $30^3$  voxels,  $460 \mu\text{m}$  de aresta, segmentadas em duas e cinco fases diferentes. As geometrias com  $60^3$  elementos,  $920 \mu\text{m}$  de aresta, são mostradas nas figuras 19a e 19b, segmentadas com duas e cinco fases respectivamente. Já as figuras 20a e 20b mostram a geometria com  $90^3$  elementos,  $1380 \mu\text{m}$  de aresta, para duas e cinco fases, nesta ordem.

Os resultados obtidos para as geometrias acima descritas segmentadas em duas fases são mostradas nas figuras 21 e 22. A primeira mostra o módulo volumétrico efetivo para cada uma das geometrias em cada condição de contorno, enquanto a segunda mostra o módulo de cisalhamento efetivo, nas mesmas condições.



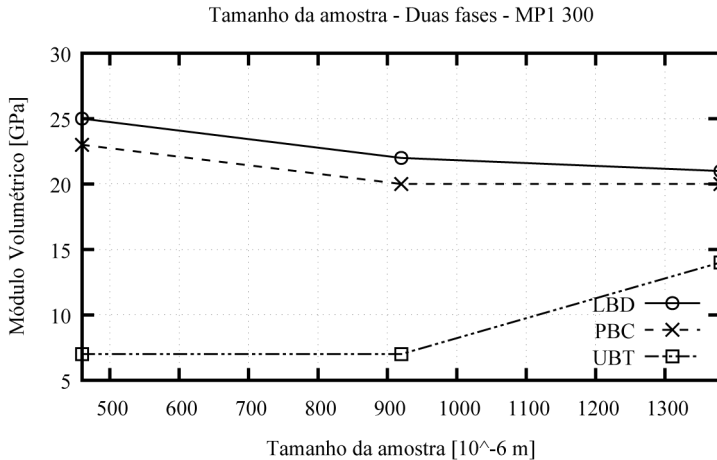
**Figura 19:** Amostra de  $200^3$  voxels discretizada com  $60^3$  elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com  $920 \mu\text{m}$  de aresta.



**Figura 20:** Amostra de  $300^3$  voxels discretizada com  $30^3$  elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com  $1380 \mu\text{m}$  de aresta.

O comportamento relativo das curvas entre si é semelhante para as duas propriedades e mostra que as curvas LBD e PBC seguem bem próximas.

Quando comparadas às outras duas condições, as análises utilizando tensões constantes no contorno (UBT) apresentam valores muito distantes



**Figura 21: Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentadas com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**

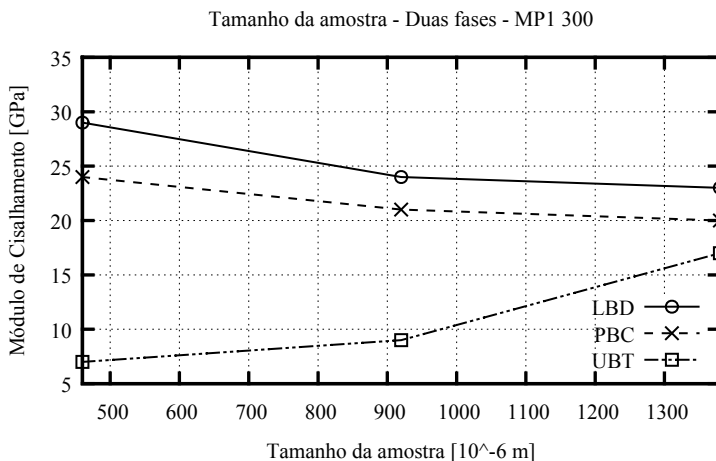
para os dois menores RVEs. Já para o maior, o resultado das simulações utilizando UBT tem apenas uma pequena diferença para as outras duas condições de contorno. Em especial, para o módulo de cisalhamento (Figura 22), o valor obtido em UBT está bem próximo dos outros dois. Nota-se uma grande evolução nos valores do RVE intermediário para o maior RVE.

Destaca-se ainda, que, para o módulo volumétrico, não há nenhuma evolução no valor para a condição UBT com os dois menores RVEs (30 e 60).

Os resultados obtidos para as geometrias com cinco fases são mostrados, respectivamente, nas figuras 23 e 24. A primeira mostra a evolução do módulo volumétrico e a segunda do módulo de cisalhamento homogeneizado com o aumento do tamanho da amostra.

Da mesma forma que ocorrido para as geometrias discretizadas com duas fases, as curvas de LBD e PBC caminham bem próximas.

Os valores obtidos utilizando trações constantes no contorno estão



**Figura 22: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentadas com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**

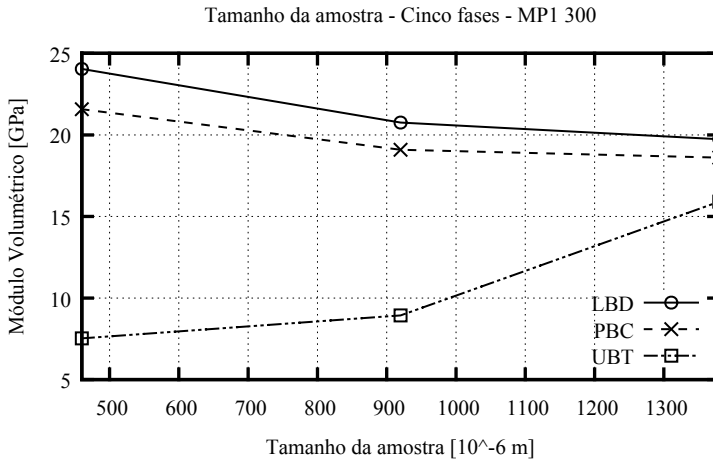
bem afastados dos outros dois para a menor geometria. Esta distância diminui para a intermediária e evolui para valores satisfatórios na terceira, ficando muito próximo das outras duas condições.

Isto pode ser observado na Figura 24, por exemplo, que mostra que o módulo de cisalhamento na condição UBT quase coincide com o valor obtido para a condição PBC.

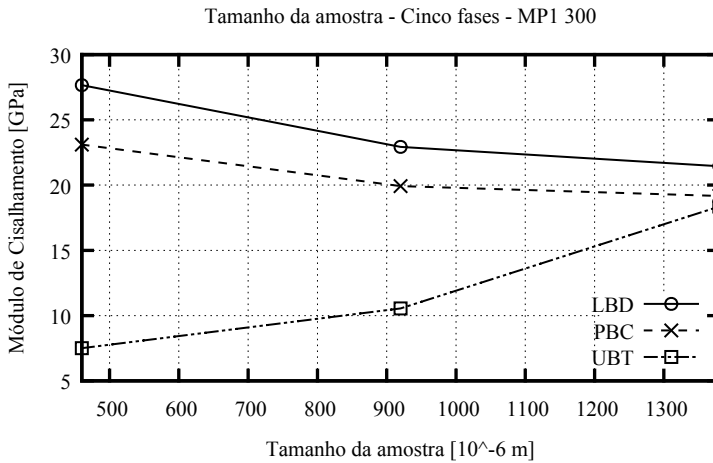
#### 4.3.2 RVEs baseados em MP2 300

O mesmo procedimento descrito em 4.3.1, para a rocha MP1 300, foi aplicado na amostra MP2 300.

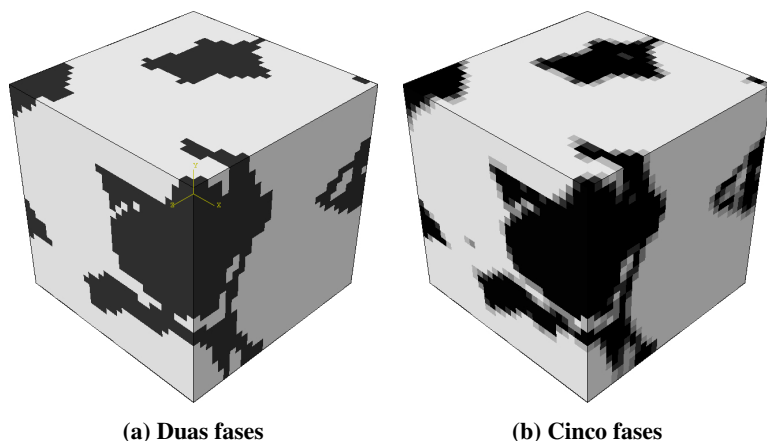
A Figura 25 mostra as geometrias com duas (25a) e cinco (25a) fases. Elas foram criadas retirando uma amostra de  $100^3$  elementos da geometria original, MP2 300, e utilizando a técnica de redução do número de voxels, descrita em 4.1.3, reduziu-se para  $30^3$  voxels.



**Figura 23: Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**



**Figura 24: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP1 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**



**Figura 25:** Amostra de  $100^3$  voxels discretizada com  $30^3$  elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com  $560 \mu m$  de aresta.

A segunda geometria é uma amostra de  $200^3$  voxels, retirada da rocha original e reduzida para  $60^3$  voxels. É mostrada segmentada em duas fases na Figura 26a e em cinco fases na 26b.

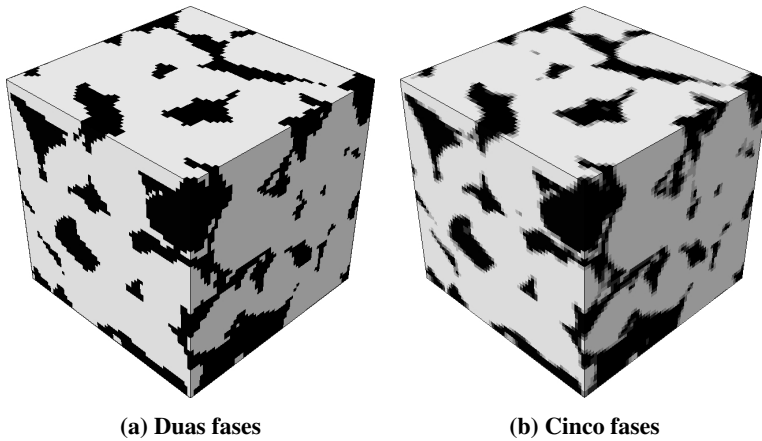
Por último, a geometria original foi reduzida para uma com  $90^3$  elementos, e depois segmentada em duas e cinco fases, como mostrada nas Figuras 27a e 27b respectivamente.

A Figura 28 mostra os módulos volumétricos efetivos para as geometrias com duas fases. Já na Figura 29 são mostrados os módulos de cisalhamento efetivos.

Nestes gráficos é possível notar um comportamento não observado anteriormente e diferente do esperado. Os valores obtidos para ambas propriedades na condição com tensões constantes no contorno diminuí com o aumento do tamanho da menor geometria para a intermediária. Porém, ao aumentar ainda mais o tamanho da amostra analisada, passando da intermediária para a maior, há o enrijecimento esperado.

Deve-se notar que, diferentemente do exemplo 4.2, ao aumentar o RVE neste caso, não há repetição de um padrão de microestrutura, sendo

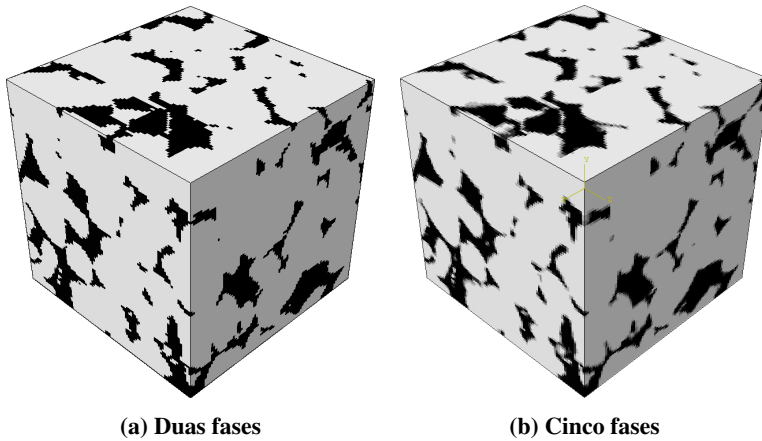




(a) Duas fases

(b) Cinco fases

Figura 26: Amostra de  $200^3$  voxels discretizada com  $60^3$  elementos finitos utilizando duas e cinco fases, representando uma amostra com  $1020 \mu\text{m}$  de aresta.

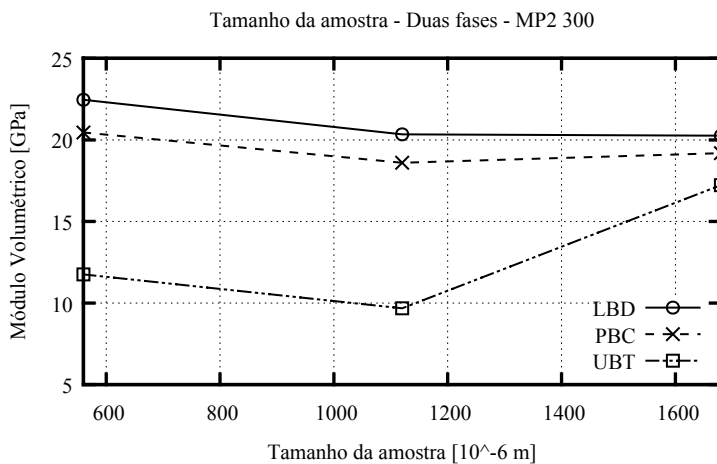


(a) Duas fases

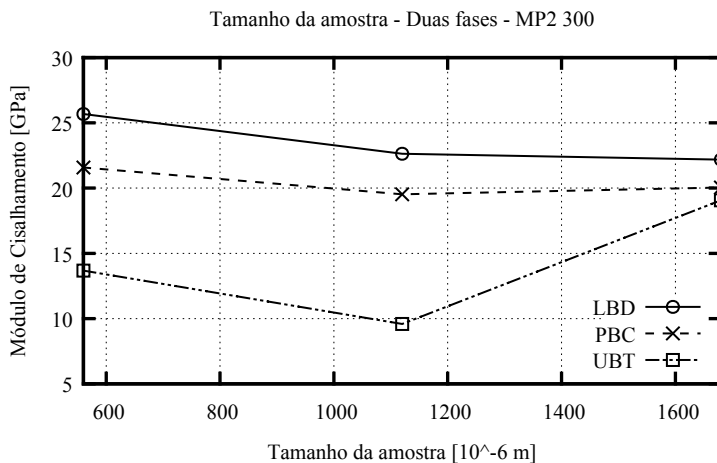
(b) Cinco fases

Figura 27: Amostras utilizadas na análise de convergência da geometria MP2 300. O tamanho do voxel foi aumentado na proporção de 3 para 10. A segmentação foi feita em duas e cinco fases. A amostra conta com  $1680 \mu\text{m}$  de aresta

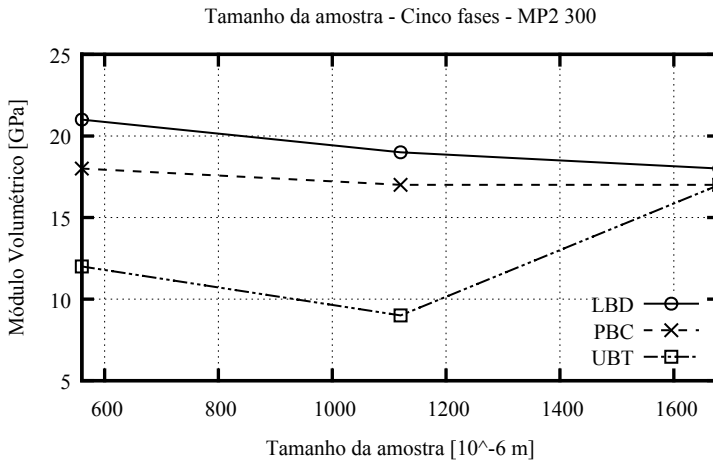
incorporadas novas geometrias cuja rigidez homogeneizada pode variar alterando um padrão monotônico de convergência. Espera-se entretanto que para um RVE suficientemente grande, esta convergência seja observada.



**Figura 28:** Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.



**Figura 29:** Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com duas fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.



**Figura 30: Módulo volumétrico homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**

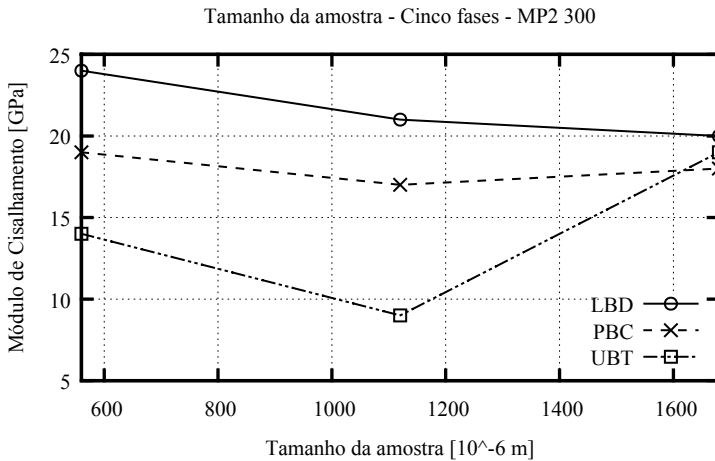
Considerando os fatos mencionados anteriormente, as curvas mostram que com o aumento do tamanho da amostra há uma convergência nos valores, principalmente ao notar-se que os valores homogeneizados para a maior geometria são muito próximos.

São apresentados nas figuras 30 e 31, respectivamente, os módulos volumétrico e de cisalhamento homogeneizados, para as geometrias discretizadas em cinco fases.

Como para as geometrias com duas fases, há uma inesperada redução da rigidez para a geometria intermediária com a condição com tensões constantes no contorno.

Além disso, outro fato diferente ocorreu, com o valor do módulo de cisalhamento homogeneizado para a condição com tensões constantes ficando acima do com deslocamentos periódicos.

Os valores das curvas LBD e PBC começam relativamente próximos e se aproximam mais ainda com o aumento da amostra simulada. Já a curva



**Figura 31: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para diferentes amostras da geometria MP2 300 segmentada com cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**

UBT começa mais afastada, mas, para a maior geometria, apresenta valores bem próximos das demais, mostrando que esta condição necessita de uma amostra maior que as outras para alcançar valores confiáveis.

#### 4.4 COMPARAÇÃO ENTRE SEGMENTAÇÃO COM DUAS E CINCO FASES

Visando avaliar a influência do tipo de segmentações com duas ou cinco fases os gráficos dos resultados em 4.3 são adaptados para ressaltar esta comparação.

##### 4.4.1 RVEs baseados em MP1 300

As geometrias consideradas nesta análise são as mesmas da Seção 4.3.1, mostradas nas figuras 18, 19 e 20.

Os resultados das figuras 22 e 24, que mostram os resultados individuais do módulo de cisalhamento para a geometria com duas e cinco fases, respectivamente, são mostrados, juntos, na Figura 32. Nesta figura, os resultados para duas fases são representados pelas linhas vermelhas. Já as linhas pretas mostram os resultados para a geometria com cinco fases.

O mesmo procedimento foi feito para o módulo volumétrico. A Figura 33 compila os mesmos resultados mostrados nas figuras 21 e 23 para, respectivamente, duas e cinco fases.

Comparando os resultados, é possível notar que para as condições LBD e PBC os valores com cinco fases são menores, i.e. a geometria apresenta uma rigidez menor, enquanto para a UTB os resultados mostram uma rigidez maior.

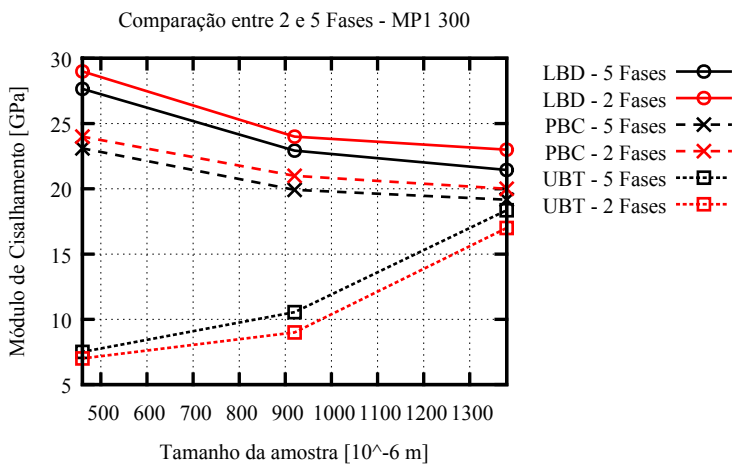
O fato de UTB ter uma rigidez maior e LBD uma menor faz com que os contornos inferior e superior dos valores esperados estejam mais próximas. Isto quer dizer que os resultados para as geometrias se aproximam mais de um resultado central (se aproximando mais da convergência) que a mesma geometria segmentada com duas fases.

#### **4.4.2 RVEs baseados em MP2 300**

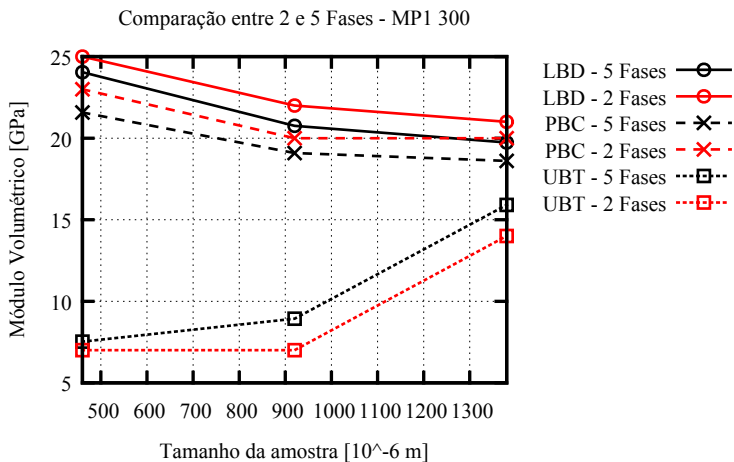
Os resultados obtidos com as geometrias mostradas na seção 4.3.2, nas figuras 25, 26 e 27 são usados nesta análise.

Nas Figuras 34 e 35 são mostrados os módulos de cisalhamento e volumétrico, respectivamente, homogeneizados, para as geometrias segmentadas em duas e cinco fases, compilando resultados já mostrados anteriormente nas figuras 28, 30, 29 e 31.

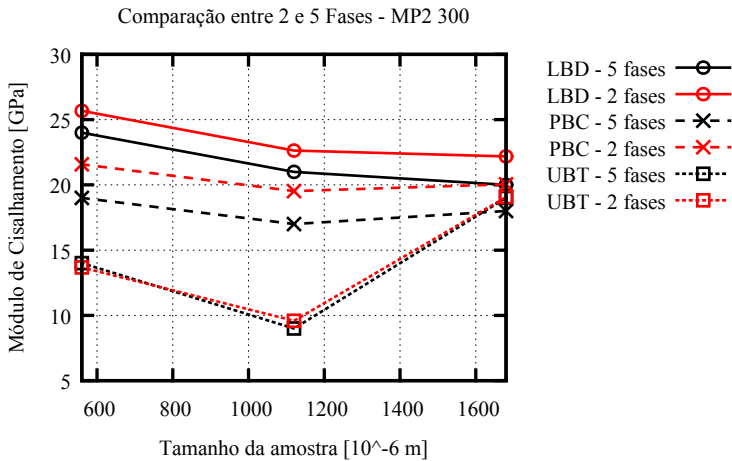
É possível observar que as curvas para LBD e PBC para a geometria com cinco fases (curvas em preto) apresentam resultados menores, i.e. menos rígidos, do que aquelas para a geometria com duas fases.



**Figura 32:** Comparação entre os módulos de cisalhamento homogêneos obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP1 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.



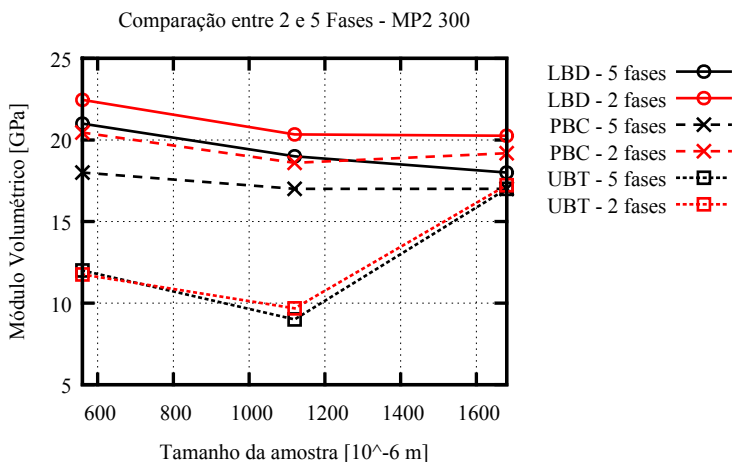
**Figura 33:** Comparação entre os módulos volumétricos homogêneos obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP1 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.



**Figura 34: Comparação entre os módulos de cisalhamento homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP2 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.**

Para a condição com tensões constantes no contorno, tem-se resultados bastante semelhantes para os dois tipos de segmentação, ao contrário do apresentado nas geometrias MP1 300, na qual a geometria com cinco fases, com a condição UBT, apresentava valores mais rígidos do que os apresentados pela geometria de duas fases.

Como consequência da menor rigidez apresentada pelas geometrias com cinco fases nas condições LBD e PBC, os valores finais para a geometria maior ficaram mais próximos entre si para segmentação com cinco fases do que para duas fases, mostrando que é possível obter uma melhor taxa de convergência de tal forma.



**Figura 35:** Comparação entre os módulos volumétricos homogeneizados obtidos para amostras de diferentes tamanhos retiradas de MP2 300, segmentadas com duas e cinco fases, utilizando as três condições de contorno diferentes.

#### 4.5 ESTUDO DA VIABILIDADE DE ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES USANDO SUB-AMOSTRAS DO RVE

Através deste estudo, procura-se investigar se é possível determinar as propriedades efetivas de uma amostra com um grande número de voxels através da média das propriedades de sub-amostras desta geometria.

A amostra rochosa estudada é a MP2 600, mostrada na Figura 13, que conta com  $600^3$  voxels com  $5,6 \mu\text{m}$  de aresta.

Os testes foram realizados com dois tamanhos diferentes de sub-amostras. No primeiro, elas foram geradas a partir da divisão da geometria original em  $3 \times 3 \times 3 = 27$  subgeometrias de  $200^3$  voxels cada uma, que foram reduzidas para  $60^3$  elementos finitos e segmentadas utilizando cinco fases.

No segundo teste a geometria original foi dividida em  $2 \times 2 \times 2 = 8$  subgeometrias com  $300^3$  da geometria original, reduzidas para  $90^3$  elementos finitos cada uma com segmentação de cinco fases.



### 4.5.1 Amostras 60<sup>3</sup>

Exemplos das geometrias analisadas neste estudo são mostrados na Figura 36. Observando os resultados sumarizados na Tabela 4 e mostrados nas figuras 37 e 38, que apresentam os valores das propriedades homogêneas obtidas para cada sub-amostra em função da sua porosidade, e , nota-se que:

1. As análises com condição LBD são as que apresentam os valores mais elevados, como esperado. Também são os que apresentam menor dispersão (menor coeficiente de variação).
2. Simulações com UBT resultam em valores bem dispersos e muito baixos, principalmente se for observada a região com porosidade média, 0,22, nota-se que os resultados estão bem mais distantes do que para as mesmas geometrias com as outras duas condições.
3. A condição com deslocamentos periódicos no contorno (PBC) resulta em valores intermediários entre as duas outras condições. O coeficiente de variação também é intermediário com relação aos casos com as outras duas condições.
4. No gráfico é possível observar a dependência das propriedades com a porosidade. Isso é visto pela tendência formada nos gráficos para os casos LBD e PBC.
5. A causa da grande variação nos resultados para UBT pode estar na quantidade de poros no contorno do RVE. Como são aplicadas tensões no contorno, uma grande quantidade de vazios na mesma dificultaria tal tarefa.

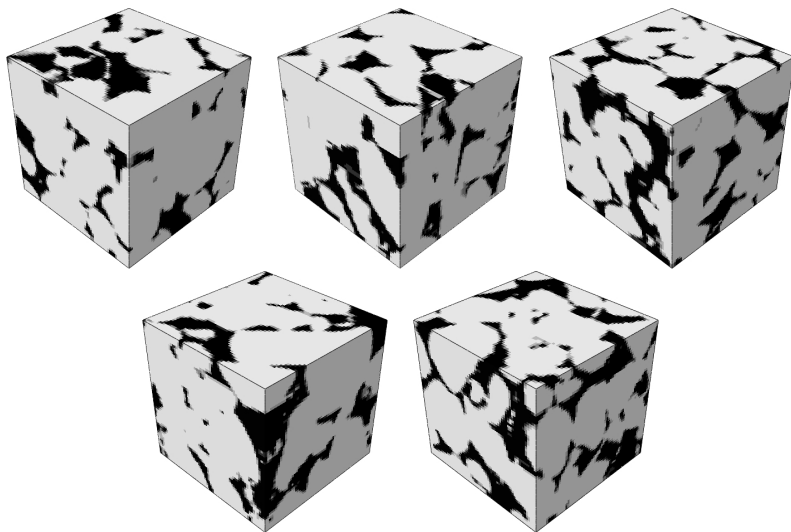


Figura 36: Exemplos de sub-amostras analisadas neste estudo. As geometrias tem  $60^3$  elementos e representam  $\frac{1}{27}$  da geometria MP2 600.

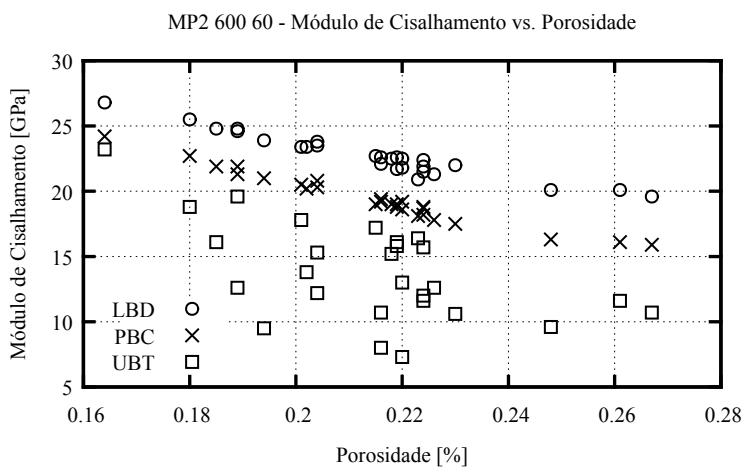
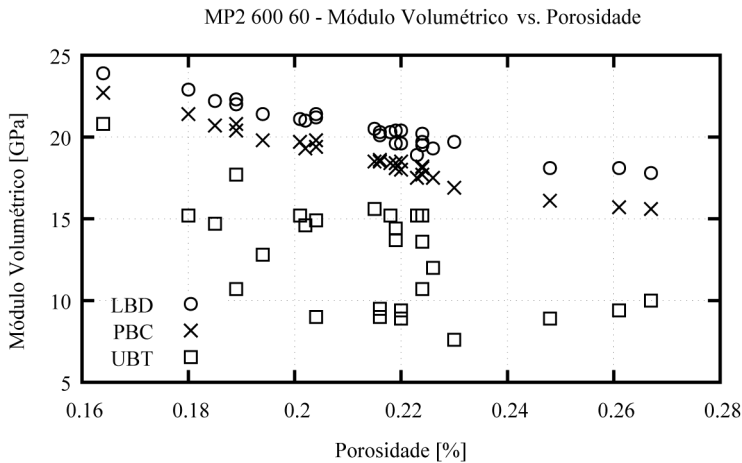


Figura 37: Módulo volumétrico homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes.

Propriedade	CC	Mínimo	Máximo	Média	Coef. de Variação
Porosidade	-	0,164	0,267	0,214	0,107
K	LBD	17,79	23,94	20,44	0,070
K	PBC	15,56	22,72	18,67	0,088
K	UBT	7,56	20,77	12,73	0,252
G	LBD	19,58	26,78	22,69	0,074
G	PBC	15,90	24,22	19,43	0,100
G	UBT	7,33	23,18	13,82	0,266

**Tabela 4: Resultados mínimos, máximos e médios obtidos para o módulo de cisalhamento e volumétrico nas 27 subamostras com  $60^3$  voxels com as três condições de contorno estudadas.**

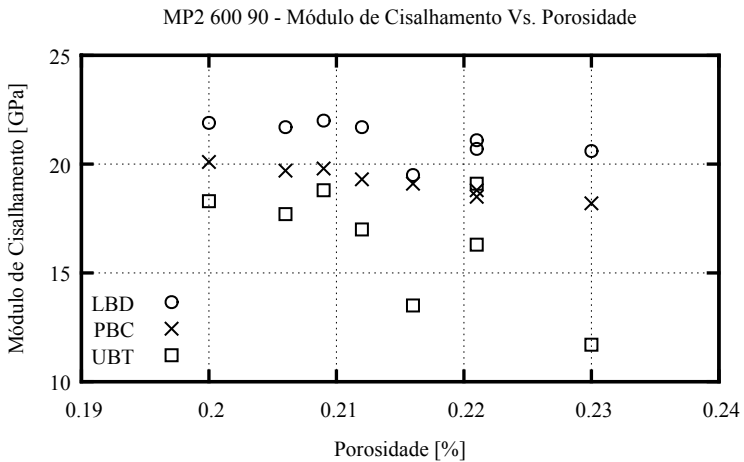


**Figura 38: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes.**

#### 4.5.2 Amostras $90^3$

Os resultados das análises das oito geometrias geradas são mostradas nos gráficos 39 e 40 e na Tabela 5. Nota-se que:

1. Como esperado, as análises usando LBD apresentam os valores maiores de rigidez, seguidos por PBC e depois UBT.

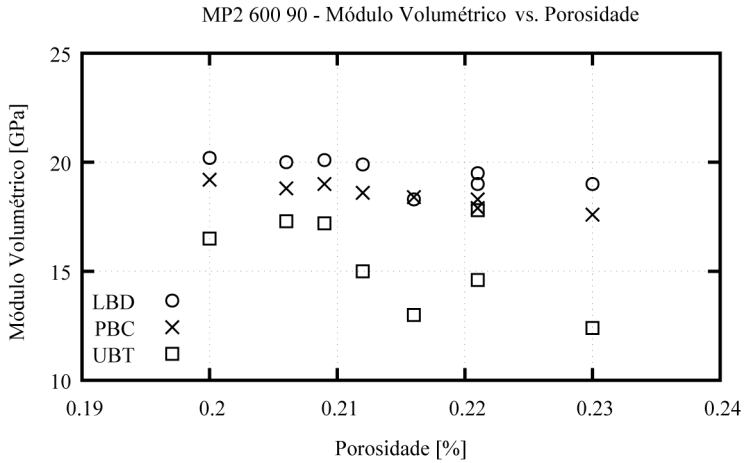


**Figura 39: Módulo volumétrico homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes.**

2. Não é possível observar claramente nos gráficos uma tendência da influência da porosidade na rigidez, como para os casos com  $60^3$  elementos. Isto pode se dever ao fato de haver um número insuficiente de amostras para representar tal fenômeno.
3. Novamente os casos UBT mostram uma grande variação nos resultados apresentados, com altos coeficiente de variação.
4. Tanto os casos de LBD quanto os de PBC apresentam coeficientes de variação na mesma ordem de grandeza.

#### 4.5.3 Comparação entre $60^3$ e $90^3$

Ao se comparar os resultados obtidos nas análises com amostras de  $60^3$  e  $90^3$  pode-se fazer algumas conclusões sobre influência do tamanho das sub-amostras no resultado. Sumariza-se os resultados médios das análises na



**Figura 40: Módulo de cisalhamento homogeneizado obtido para as geometrias analisadas utilizando as três condições de contorno diferentes.**

Propriedade	CC	Mínimo	Máximo	Média	Coef. de Variação
Porosidade	-	0,200	0,230	0,214	0,042
K	LBD	18,28	20,17	19,48	0,033
K	PBC	17,64	19,22	18,48	0,028
K	UBT	12,40	17,79	15,47	0,124
G	LBD	18,20	20,11	19,19	0,032
G	PBC	19,51	21,95	21,15	0,038
G	UBT	11,70	19,14	16,54	0,150

**Tabela 5: Resultados mínimos, máximos e médios obtidos para o módulo de cisalhamento e volumétrico nas 8 subamostras com  $90^3$  voxels com as três condições de contorno estudadas.**

Tabela 6.

A análise dos resultados mostra que há uma melhora dos resultados para o caso LBD quando se aumenta o tamanho da amostra. Há uma redução de 5% e 7% nos valores de K e G, respectivamente, quando se aumenta o tamanho da amostra.

Para a condição UBT há um aumento de 16% e 17% nos valores de de

Propriedade	CC	Média 60	Coef. de Variação 60	Média 90	Coef. de Variação 90
Porosidade	-	0,214	0,107	0,214	0,042
K	LBD	20,44	0,070	19,48	0,033
K	PBC	18,67	0,088	18,48	0,028
K	UBT	12,73	0,252	15,47	0,124
G	LBD	22,69	0,074	21,15	0,032
G	PBC	19,43	0,100	19,19	0,038
G	UBT	13,82	0,266	16,54	0,150

**Tabela 6: Resultados médios de módulo volumétrico e cisalhamento obtidos nas análises de subamostras com  $60^3$  e  $90^3$  voxels.**

K e G respectivamente, tomando como referência o valor obtido para análise com a maior sub-amostra. Há também uma redução no desvio padrão. Com condições periódicas a diferença é pequena para os dois casos, na ordem de 1%.

Considerando essas observações, é possível concluir que as amostras com  $60^3$  são suficientes para representar a amostra com condições periódicas, visto a pequena diferença nos resultados quando se aumenta a amostra.

Para as análises com LBD, há uma redução considerável nos valores e as médias se aproximam bastante daquelas com PBC, mas não se pode afirmar que o tamanho da amostra seja suficiente para representar a geometria.

Já os valores médios obtidos nas análises com UBT estão distantes das obtidas com outras condições de contorno, mostrando que amostras maiores são necessárias.

O menor desvio padrão obtido nas análises com  $90^3$  elementos mostra que tais análises conduzem a valores de homogeneização mais confiáveis e representativos do material.



## 5 DISCUSSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

A caracterização de rochas de reservatório é um passo importante para o melhor entendimento e interpretação de dados sísmicos obtidos durante a prospecção de campos de petróleo.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um método numérico capaz de fornecer propriedades elásticas efetivas tendo como entrada a geometria digitalizada de uma rocha e as propriedades elásticas de seus constituintes. Tal modelo foi elaborado e implementado em um software comercial de Elementos Finitos.

Como parte desse processo, um estudo sobre os diferentes tipos de abordagem para este problema foi feito, considerando os dois principais métodos presentes na literatura, dinâmicos e quasiestáticos. O modelo de homogeneização foi escolhido e detalhado, assim como as diferentes classes de periodicidade utilizadas. A formulação foi adaptada para a forma discreta, possibilitando assim a sua implementação num código numérico.

Devido às limitações computacionais foi necessário se reduzir o número de elementos usados na amostra. Para tal, se desenvolveu um código que recebe a geometria original e a discretiza com o número de elementos desejado, preservando as características geométricas da mesma. Esta nova geometria pode ser descrita com dois materiais ou mais (considera-se então materiais intermediários entre matriz e vazios) de forma a suavizar a fronteira entre matriz e poros.

A solução do problema através do modelo desenvolvido, por fim, passa por diversas etapas. Começa pela redução do número de voxels da amostra, determinação do número de fases com que se deseja representar a geometria, escolha entre as três condições de contorno estudadas, realização dos ensaios numéricos, extração da matriz constitutiva equivalente e a extração das propriedades elásticas equivalentes isotrópicas.



Tendo todo este aparato pronto, foi possível realizar alguns ensaios com amostras de arenitos obtidos através de microtomografia. Dentre os estudos realizados procurou-se observar como o modelo e as diferentes condições de contorno se comportam: aumentando o número de repetições da microestrutura dentro do RVE; aumentando o tamanho da amostra da rocha; utilizando duas ou cinco fases para a definição da geometria; utilizando subamostras do RVE para calcular as propriedades do RVE completo.

A utilização de um código comercial inviabilizou o tratamento numérico das condições de contorno de maneira a reduzir o tamanho e acoplamento das equações. No caso, por exemplo, de condições de contorno com deslocamentos flutuantes periódicos no contorno (PBC), cada restrição associando o deslocamento relativo entre dois nós envolve a adição de três equações no sistema. Isto, ampliado para o número de nós da superfície do RVE, não somente faz aumentar em forma significativa o número de equações, mas também modifica a estrutura do sistema algébrico reduzindo de forma importante a performance de solução. Códigos próprios entretanto permitem tratamentos mais eficientes como eliminação de equações e variáveis, reduzindo e não ampliando o sistema.

Durante estes estudos pôde-se observar que, de maneira geral, os resultados confirmam a literatura, mostrando que a condição LBD é a mais rígida dentre as três, fornecendo um limite superior para as propriedades efetivas enquanto a UBT é a que impõe menos rigidez ao sistema, configurando um limite inferior para tais valores. A condição PBC apresenta valores intermediários entre as duas.

Notou-se também que, geralmente, com o aumento do tamanho da amostra ou do número de repetições da célula básica, os valores para LBD e UBT foram se aproximando dos de PBC, configurando o efeito da convergência das propriedades aos valores esperados.

Ainda, para um material com microestrutura periódica, onde é possível

isolar a célula básica desta microestrutura, a condição PBC apresentou os mesmos resultados para a célula básica e também para RVEs com repetição linear de duas e três células por aresta, mostrando-se recomendável para este tipo de estrutura. As outras duas condições, LBD e UBT, definiram os limites superiores e inferiores para os resultados, aproximando-se de PBC com o aumento do número de repetições da célula básica.

Observou-se em quase todos os estudos que o aumento do tamanho da amostra analisada leva os resultados obtidos para as três condições de contorno para valores mais próximos, mostrando que estes estão convergindo, tanto para duas quanto para cinco fases.

Quando comparados, os resultados obtidos com geometrias discretizadas com cinco fases fornecem valores menos rígidos do que para a mesma geometria discretizada com duas fases para as condições LBD e PBC e mais rígidos para UBT, diminuindo assim a diferença entre os limites inferior e superior das propriedades. Sendo assim, pode-se afirmar que há um incremento na velocidade de convergência dos resultados ao utilizar mais fases para representar a geometria.

Quanto ao uso de sub-amostras para o cálculo das propriedades efetivas, tem-se que quanto maior o valor da amostra, mais confiáveis estes serão, o que já era esperado pelos resultados dos estudos com diferentes tamanhos de sub-amostras. Análises com sub-amostras maiores apresentaram valores mais próximos entre as diferentes condições de contorno, além de menor coeficiente de variação.

Por último, devido à forma que as condições de contorno são aplicadas, a condição UBT mostrou-se muito sensível à área porosa no contorno do RVE, fornecendo resultados com uma rigidez baixíssima e/ou fora do padrão esperado, como por exemplo no estudo das sub-amostras, onde se observa uma linha de tendência para os resultados de LBD e PBC em função da porosidade e tal comportamento não é visto para UBT.

Considerando tais conclusões e outras dificuldades encontradas durante a execução deste trabalho, ficam propostas como sugestões para trabalhos futuros:

- Resolver o problema de limitação numérica para que o modelo possa ser capaz de analisar RVEs maiores, como alguns trabalhos na literatura mostram ser possível.
- Trabalhar, de forma tensorial, com a matriz obtida do processo de homogeneização afim de observar direções principais, de forma a poder identificar propriedades efetivas em cada direção (propriedades ortotrópicas).
- Melhorar o método de aplicação das condições de contorno UBT, de forma a evitar os problemas observados para amostras pequenas com muitos vazios no contorno.
- Conduzir tratamentos estatísticos na microestrutura buscando melhoras na convergência e na exatidão dos valores homogeneizados da microestrutura, abordagem já presente na literatura (COTTEREAU, 2013).

## REFERÊNCIAS

- ANDRÄ, H.; COMBARET, N.; DVORKIN, J.; GLATT, E.; HAN, J.; KABEL, M.; KEEHM, Y.; KRZIKALLA, F.; LEE, M.; MADONNA, C.; MARSH, M.; MUKERJI, T.; SAENGER, E. H.; SAIN, R.; SAXENA, N.; RICKER, S.; WIEGMANN, A.; ZHAN, X. Digital rock physics benchmarks-part i: Imaging and segmentation. **Comput. Geosci.**, Pergamon Press, Inc., Tarrytown, NY, USA, v. 50, p. 25–32, jan. 2013. ISSN 0098-3004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2012.09.005>>.
- ANDRÄ, H.; COMBARET, N.; DVORKIN, J.; GLATT, E.; HAN, J.; KABEL, M.; KEEHM, Y.; KRZIKALLA, F.; LEE, M.; MADONNA, C.; MARSH, M.; MUKERJI, T.; SAENGER, E. H.; SAIN, R.; SAXENA, N.; RICKER, S.; WIEGMANN, A.; ZHAN, X. Digital rock physics benchmarks-part ii: Computing effective properties. **Comput. Geosci.**, Pergamon Press, Inc., Tarrytown, NY, USA, v. 50, p. 33–43, jan. 2013. ISSN 0098-3004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2012.09.008>>.
- ARNS, C. H.; KNACKSTEDT, M. A.; PINCZEWSKI, W. V.; GARBOCZI, E. J. Computation of linear elastic properties from microtomographic images: Methodology and agreement between theory and experiment. **Geophysics**, SEG, v. 67, n. 5, p. 1396–1405, 2002. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?GPY/67/1396/1>>.
- ARNS, C. H.; MADADI, M.; SHEPPARD, A. P.; KNACKSTEDT, M. A. Linear elastic properties of granular rocks derived from x-ray-ct images. **SEG Technical Program Expanded Abstracts**, SEG, v. 26, n. 1, p. 1711–1715, 2007. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?SGA/26/1711/1>>.
- BAUER, W.; WESTFALL, G.; DIAS, H. **Física para Universitários - Relatividade, Oscilações, Ondas e Calor**. McGraw Hill Brasil, 2013. ISBN 9788580551600. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=796EMutjMtYC>>.
- CNUUDE, V.; BOONE, M. High-resolution x-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications. **Earth-Science Reviews**, v. 123, n. 0, p. 1 – 17, 2013. ISSN 0012-

8252. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001282521300069X>>.

COTTEREAU, R. A stochastic-deterministic coupling method for multiscale problems. application to numerical homogenization of random materials. **Procedia {IUTAM}**, v. 6, n. 0, p. 35 – 43, 2013. ISSN 2210-9838. {IUTAM} Symposium on Multiscale Problems in Stochastic Mechanics. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210983813000059>>.

DVORKIN, J.; DERZHI, N.; DIAZ, E.; FANG, Q. Relevance of computational rock physics. **Geophysics**, v. 76, n. 5, p. E141–E153, 2011. Disponível em: <<http://geophysics.geoscienceworld.org/content/76/5/E141-abstract>>.

DVORKIN, J.; FANG, Q.; DERZHI, N. Etudes in computational rock physics: Alterations and benchmarking. **Geophysics**, v. 77, n. 3, p. D45–D52, 2012. Disponível em: <<http://geophysics.geoscienceworld.org/content/77/3/D45.abstract>>.

DVORKIN M. ARMBRUSTER, C. B. Q. F. N. D. C. G. B. N. A. N. J. The future of rock physics: computational methods vs. lab testing. **First Break**, v. 8, p. 6, 2008.

FISH, J.; BELYTSCHKO, T. **A First Course in Finite Elements**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007.

GARBOCZI, E. J. **Finite Element and Finite Difference Programs for Computing the Linear Electric and Elastic Properties of Digital Images of Random Materials**. [S.l.], December 1998.

GURTIN, M. **An Introduction to Continuum Mechanics**. Elsevier Science, 1982. (Mathematics in Science and Engineering). ISBN 9780080918495. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=W-0b09yIq4C>>.

HASSANI, B.; HINTON, E. **Homogenization and Structural Topology Optimization: Theory, Practice, and Software**. Springer, 1999. ISBN 9783540762119. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=bctRAAAAMAAJ>>.

HILL, R. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 11, n. 5, p. 357 –

- 372, 1963. ISSN 0022-5096. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002250966390036X>>.
- HILL, R. A self-consistent mechanics of composite materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 13, n. 4, p. 213 – 222, 1965. ISSN 0022-5096. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509665900104>>.
- HUGHES, T. J. R. **The Finite Element Method**. [S.l.]: Prentice Hall, 1987.
- IASSONOV, P.; GEBRENEGUS, T.; TULLER, M. Segmentation of x-ray computed tomography images of porous materials: A crucial step for characterization and quantitative analysis of pore structures. **Water Resources Research**, v. 45, n. 9, p. n/a–n/a, 2009. ISSN 1944-7973. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1029/2009WR008087>>.
- KETCHAM, R. A.; CARLSON, W. D. Acquisition, optimization and interpretation of x-ray computed tomographic imagery: Applications to the geosciences. **Comput. Geosci.**, Pergamon Press, Inc., Tarrytown, NY, USA, v. 27, n. 4, p. 381–400, maio 2001. ISSN 0098-3004. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0098-3004\(00\)00116-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0098-3004(00)00116-3)>.
- LERNER, L. **Physics: for scientists and engineers ; Modern physics : for scientists and engineers**. Jones and Bartlett, 1996. ISBN 9780867204797. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=kJOnAvimS44C>>.
- LI, S.; WONGSTO, A. Unit cells for micromechanical analyses of particle-reinforced composites. **Mechanics of Materials**, v. 36, n. 7, p. 543 – 572, 2004. ISSN 0167-6636. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167663603000620>>.
- MADADI, M.; JONES, A. C.; ARNS, C. H.; KNACKSTEDT, M. A. 3d imaging and simulation of elastic properties of porous materials. **Computing in Science and Engg.**, IEEE Educational Activities Department, Piscataway, NJ, USA, v. 11, p. 65–73, July 2009. ISSN 1521-9615. Disponível em: <<http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1591877.1592022>>.
- MALVERN, L. **Introduction to the mechanics of a continuous medium**. Prentice-Hall, 1969. (Prentice-Hall series in engineering of the physical sciences). Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=IIMpAQAAAJ>>.

- MANDEL, J. **Plasticité classique et viscoplasticité: course held at the Department of Mechanics of Solids, September-October, 1971**. Springer-Verlag, 1972. (Courses and lectures - International Centre for Mechanical Sciences). ISBN 9780387811970. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=h8RQAAAAYAAJ>>.
- MAVKO, G.; MUKERJI, T.; DVORKIN, J. **The Rock Physics Handbook**. Cambridge University Press, 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511626753>>.
- MEESE, F.; LONDON, G. S. of. **Applications of X-ray Computed Tomography in the Geosciences**. Geological Society, 2003. (Applications of X-ray Computed Tomography in the Geosciences, v. 1). ISBN 9781862391390. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=AuKNi2UYSxIC>>.
- NETO, E. A. d. S.; FEIJÓO, R. A. **Variational Foundations of Multi-Scale Constitutive Models of Solid: Small and Large Strain Kinematical Formulation**. 11 2006. LNCC R&D Report.
- OSTOJA-STARZEWSKI, M. Scale effects in materials with random distributions of needles and cracks. **Mechanics of Materials**, v. 31, n. 12, p. 883 – 893, 1999. ISSN 0167-6636. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167663699000393>>.
- QUINTAL, B.; FREHNER, M.; MADONNA, C.; TISATO, N.; KUTEYNIKOVA, M.; SAENGER, E. H. Integrated numerical and laboratory rock physics applied to seismic characterization of reservoir rocks. **The Leading Edge**, SEG, v. 30, n. 12, p. 1360–1367, dez. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1190/1.3672480>>.
- SAENGER, E. H. Numerical methods to determine effective elastic properties. **International Journal of Engineering Science**, v. 46, n. 6, p. 598–605, jun. 2008. ISSN 0020-7225. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020722508000116>>.
- SAENGER, E. H.; ENZMANN, F.; KEEHM, Y.; STEEB, H. Digital rock physics: Effect of fluid viscosity on effective elastic properties. **Journal of Applied Geophysics**, v. 74, n. 4, p. 236 – 241, 2011. ISSN 0926-9851. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0926985111001005>>.

SAENGER, E. H.; GOLD, N.; SHAPIRO, S. A. Modeling the propagation of elastic waves using a modified finite-difference grid. **Wave Motion**, v. 31, n. 1, p. 77 – 92, 2000. ISSN 0165-2125. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0165212599000232>>.

SMITH, G. **Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods**. Clarendon Press, 1985. (Oxford applied mathematics and computing science series). ISBN 9780198596509. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=TwFInwEACAAJ>>.

THOMAS, J. **Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods**. Springer, 1995. (Graduate Texts in Mathematics, v. 1). ISBN 9780387979991. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=op5COPwUfX8C>>.

THOMAS, J. E. **Fundamentos de Engenharia de Petróleo**. [S.l.]: Editora Interciência, 2001. 271 p.