

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL
DE PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO
EM BACIAS SEDIMENTARES

André Reinert Brüch

Porto Alegre
2016

ANDRÉ REINERT BRÜCH

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL
DE PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO
EM BACIAS SEDIMENTARES**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
como parte dos requisitos para obtenção do título de
Doutor em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Samir Maghous

Coorientador: Prof. Dr. Fernando Luiz Bastos Ribeiro

Porto Alegre
2016

CIP - Catalogação na Publicação

Brüch, André Reinert

Simulação numérica tridimensional de processos de
deformação em bacias sedimentares / André Reinert

Brüch. -- 2016.

270 f.

Orientador: Samir Maghous.

Coorientador: Fernando Luiz Bastos Ribeiro.

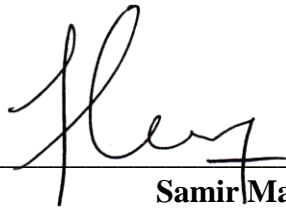
Tese (Doutorado) -- Universidade Federal do Rio
Grande do Sul, Escola de Engenharia, Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Civil, Porto Alegre, BR-RS,
2016.

1. bacia sedimentar. 2. compactação mecânica e
químico-mecânica. 3. termo-poro-mecânica. 4. termo-poro-
elasto-visco-plasticidade. 5. método dos elementos
finitos. I. Maghous, Samir, orient. II. Ribeiro,
Fernando Luiz Bastos, coorient. III. Título.

ANDRÉ REINERT BRÜCH

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL
DE PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO
EM BACIAS SEDIMENTARES**

Esta tese de doutorado foi julgada adequada para a obtenção do título de DOUTOR EM ENGENHARIA, Estruturas, e aprovada em sua forma final pelos professores orientadores e pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.



Porto Alegre 2016

Samir Maghous
Docteur École Nationale
des Ponts et Chaussées
Orientador

Fernando Luiz Bastos Ribeiro
Doutor Universidade Federal
do Rio de Janeiro
Coorientador

Carlos Torres Formoso
Coordenador do PPGEC/UFRGS

BANCA EXAMINADORA

Farid Chemale Junior (UNISINOS)
Ph.D. Technische Universität Clausthal

Eurípedes do Amaral Vargas Junior (PUC-RJ)
Ph.D. Imperial College

Anderson Moraes (PETROBRAS)
Dr. Universidade Federal do Rio de Janeiro

Armando Miguel Awruch (UFRGS)
Dr. Universidade Federal do Rio de Janeiro

RESUMO

BRÜCH, A. R. **Simulação numérica tridimensional de processos de deformação em bacias sedimentares**. 2016. 270 f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre.

O desenvolvimento de modelos teóricos e computacionais para simular a história de deformação e reconstruir o estado termoporomecânico de bacias sedimentares é de grande interesse da indústria do petróleo. A compactação dos sedimentos, o escoamento dos fluidos e o fluxo térmico são processos de grande importância que ocorrem ao longo da diagênese. Fenômenos puramente mecânicos prevalecem nas camadas superiores da bacia associados à expulsão do fluido e ao rearranjo das partículas sólidas, enquanto a compactação químico-mecânica resultante dos processos de pressão-solução intergranular é dominante nas camadas mais profundas, onde as tensões e temperaturas são maiores. Estes processos de deformação podem ser significativamente afetados pela sua evolução térmica, já que o calor altera a viscosidade dos fluidos e as propriedades físico-químicas dos minerais. O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo constitutivo para o material poroso saturado no contexto da termoporomecânica finita e uma ferramenta computacional com uma interface de multiprocessamento em memória compartilhada baseada no método dos elementos finitos para representar os processos de formação e compactação gravitacional de uma bacia sedimentar. As deformações mecânicas e químico-mecânicas são representadas pela plasticidade e viscoplasticidade, respectivamente. Uma característica fundamental do modelo está relacionada à mudança das propriedades do material poroso em função da variação de temperatura e da evolução de caráter irreversível da sua microestrutura. Simulações numéricas realizadas em condições oedométricas permitem investigar a evolução do modelo constitutivo e do comportamento global da bacia, onde é possível verificar o caráter interdependente dos diferentes processos termoporomecânicos envolvidos. A capacidade da ferramenta computacional de representar problemas tridimensionais complexos é demonstrada a partir de uma história de deposição sedimentar associada a camadas estratigráficas com espessuras variáveis.

Palavras-chave: bacia sedimentar, compactação mecânica, compactação químico-mecânica, termo-poro-mecânica, termo-poro-elasto-visco-plasticidade, método dos elementos finitos.

ABSTRACT

BRÜCH, A. R. **Tridimensional numerical simulation of deformation processes in sedimentary basins**. 2016. 270 p. Thesis (Doctorate in Civil Engineering) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre.

Development of theoretical and numerical models to simulate the deformation history and rebuild the thermoporomechanical state of sedimentary basins is of great interest for the oil industry. Compaction of sediments, fluid and thermal flows are fundamental coupled processes during diagenesis. Purely mechanical phenomena prevail in the upper layers involving pore fluid expulsion and rearrangement of solid particles, while chemo-mechanical compaction resulting from Intergranular Pressure-Solution (*IPS*) dominates for deeper burial as stress and temperature increase. The thermal evolution of the basin may substantially affect both processes as heat modifies the viscosity of fluids and physicochemical properties of minerals. The aim of the present contribution is to provide a constitutive model for saturated porous media in the context of finite thermoporomechanics and a numerical tool with a shared memory multiprocessing interface based on the finite element method to deal with depositional phase and gravitational compaction modeling of sedimentary basins. Purely mechanical and chemo-mechanical deformations are respectively modeled by means of plasticity and viscoplasticity. A key feature of the model is related to the evolution of the sediment material properties associated with temperature and large irreversible porosity changes. The evolution of the constitutive model and the overall behavior of the basin are provided by numerical simulations performed under oedometric conditions. The coupled nature of the thermoporomechanical processes is investigated. A depositional history with varying stratigraphic layers is proposed to demonstrate the ability of the numerical tool to model complex 3D problems.

Key-words: sedimentary basin, mechanical compaction, chemo-mechanical compaction, thermo-poro-mechanics, thermo-poro-elasto-visco-plasticity, finite element method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: camadas composicionais e reológicas da Terra (FAS, 2016)	22
Figura 2: convergência oceânica-oceânica (GEOWIKI, 2016).....	26
Figura 3: convergência oceânica-continental (GEOWIKI, 2016).....	27
Figura 4: convergência continental-continental (GEOWIKI, 2016)	27
Figura 5: divergência tectônica (QUIZLET, 2016).....	27
Figura 6: movimento transformante entre placas (THINGLINK, 2016).....	28
Figura 7: divisão das placas tectônicas (SOUTHUSEARTHQUAKERISK, 2016)	28
Figura 8: ciclo de Wilson (TES, 2016).....	29
Figura 9: espessura de sedimentos atual nos oceanos (Whittaker et al. 2013).....	32
Figura 10: analogia mecânica ao adensamento do solo (WIKIWAND, 2016)	35
Figura 11: etapas do processo de pressão-solução (Gundersen et al. 2002).....	36
Figura 12: mapa de fluxo térmico da Terra (WIKIPEDIA, 2016a).....	39
Figura 13: descrição geométrica do meio poroso (COUSSY, 2004)	40
Figura 14: massa específica do meio poroso em função da porosidade	41
Figura 15: descrição cinemática do meio poroso	42
Figura 16: decomposição do gradiente de transformação e variação de porosidade.....	44
Figura 17: lei de evolução da porosidade	51
Figura 18: modelo Cam-Clay modificado (COUSSY, 2004).....	53
Figura 19: comparação das leis de endurecimento exponencial e logarítmica (plasticidade sem viscoplasticidade)	54
Figura 20: função do parâmetro m na lei de endurecimento viscoplástica.....	59
Figura 21: módulos de compressão e cisalhamento em função da porosidade	62
Figura 22: coeficiente e módulo de Biot em função da porosidade	62
Figura 23: lei de permeabilidade em função da porosidade	63
Figura 24: evolução de α^ϕ em função da porosidade	67
Figura 25: diagrama de fases da água (WIKIPEDIA, 2016b).....	68
Figura 26: evolução do calor específico em função da porosidade	69
Figura 27: modelos de homogeneização do coeficiente de condutividade térmica	70
Figura 28: coeficiente c_n^s em função da temperatura	72
Figura 29: calor específico da água em função da temperatura	72
Figura 30: condutividade térmica da fase sólida em função da temperatura.....	73
Figura 31: condutividade térmica da água em função da temperatura	74
Figura 32: coeficiente de dilatação térmica da fase sólida em função da temperatura	75

Figura 33: módulo de Young em função da temperatura	76
Figura 34: coeficiente de viscosidade viscoplástico em função da temperatura	77
Figura 35: coeficiente de viscosidade da água em função da temperatura.....	78
Figura 36: curvas de permeabilidade em função da porosidade.....	79
Figura 37: curvas de permeabilidade em função da temperatura	79
Figura 38: método Lagrangeano atualizado	81
Figura 39: elemento hexaédrico de 20 nós	96
Figura 40: elemento hexaédrico de 8 nós	97
Figura 41: produto matriz-vetor utilizando CSR.....	100
Figura 42: algoritmo PCG	101
Figura 43: algoritmo de solução do sistema de equações.....	103
Figura 44: $\underline{\underline{\sigma}}^{PA}$ como projeção de $\underline{\underline{\sigma}}^*$ sobre a superfície de plasticidade (representação geométrica para $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{1}}$)	105
Figura 45: algoritmo de integração das deformações plásticas	108
Figura 46: algoritmo de integração das deformações viscoplásticas.....	115
Figura 47: algoritmo de integração simultânea das deformações plásticas e viscoplásticas..	118
Figura 48: representação esquemática do processo de deposição dos sedimentos.....	120
Figura 49: algoritmo de ativação para o processo de deposição dos sedimentos.....	123
Figura 50: fluxograma do módulo térmico.....	125
Figura 51: fluxograma do módulo poromecânico	127
Figura 52: fluxograma geral do programa termoporomecânico	129
Figura 53: discretização temporal do programa termoporomecânico	130
Figura 54: validação do módulo térmico	132
Figura 55: modelo simplificado de compactação: geometria e carregamento	133
Figura 56: modelo simplificado de compactação: evolução dos Jacobianos	143
Figura 57: modelo simplificado de compactação: evolução das tensões	144
Figura 58: geometria e condições de contorno do modelo poromecânico	147
Figura 59: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 1)	149
Figura 60: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia (caso 1).....	152
Figura 61: evolução da norma da taxa de deformação plástica na base da bacia (caso 1)	152
Figura 62: evolução da porosidade na base da bacia (caso 1).....	153
Figura 63: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 1).....	154
Figura 64: evolução da permeabilidade na base da bacia (caso 1).....	154
Figura 65: evolução das tensões efetivas na base da bacia (caso 1).....	155
Figura 66: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 1).....	155

Figura 67: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia (caso 1)	156
Figura 68: evolução da pressão de consolidação plástica na base da bacia (caso 1)	157
Figura 69: evolução da massa específica na base da bacia (caso 1)	157
Figura 70: evolução do módulo de Young na base da bacia (caso 1)	157
Figura 71: evolução do módulo de compressão na base da bacia (caso 1)	158
Figura 72: evolução do coeficiente de Biot na base da bacia (caso 1)	159
Figura 73: evolução do módulo de Biot na base da bacia (caso 1)	159
Figura 74: evolução do coeficiente de difusividade líquida na base da bacia (caso 1)	160
Figura 75: evolução do passo de tempo Δt_{ref}^f na base da bacia (caso 1)	160
Figura 76: perfil de Jacobiano plástico na bacia (caso 1)	161
Figura 77: perfil de porosidade na bacia (caso 1)	162
Figura 78: perfil de poro-pressão na bacia (caso 1)	163
Figura 79: perfil de permeabilidade na bacia (caso 1)	164
Figura 80: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 1)	165
Figura 81: perfil de relação tensão desviadora/tensão efetiva média na bacia (caso 1)	165
Figura 82: perfil de coeficiente K_0 na bacia (caso 1)	166
Figura 83: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 1)	167
Figura 84: perfil de coeficiente de difusividade líquida na bacia (caso 1)	168
Figura 85: evolução do passo de tempo δt_{min}^f ao longo da análise (caso 1)	168
Figura 86: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes taxas de deposição sedimentar (caso 1)	170
Figura 87: evolução da poro-pressão na base da bacia para diferentes taxas de deposição sedimentar (caso 1)	170
Figura 88: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes coeficientes de permeabilidade inicial (caso 1)	171
Figura 89: evolução da poro-pressão na base da bacia para diferentes coeficientes de permeabilidade inicial (caso 1)	172
Figura 90: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 2)	173
Figura 91: evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia (caso 2)	174
Figura 92: evolução da norma das taxas de deformação plástica e viscoplástica na base da bacia (caso 2)	175
Figura 93: evolução da porosidade na base da bacia (caso 2)	175
Figura 94: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 2)	177
Figura 95: evolução das tensões efetivas na base da bacia (caso 2)	178
Figura 96: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 2)	178

Figura 97: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=0$ e $t=60$ Ma (caso 2)	179
Figura 98: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=60$ e $t=136$ Ma (caso 2)	180
Figura 99: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=136$ e $t=600$ Ma (caso 2).....	181
Figura 100: evolução da pressão de consolidação na base da bacia (caso 2).....	181
Figura 101: evolução dos passos de tempo Δt_{ref} na base da bacia (caso 2).....	182
Figura 102: perfil de Jacobiano irreversível na bacia (caso 2).....	183
Figura 103: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia (caso 2).....	184
Figura 104: perfil de porosidade na bacia (caso 2).....	185
Figura 105: perfil de poro-pressão na bacia (caso 2).....	185
Figura 106: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 2)	186
Figura 107: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 2).....	186
Figura 108: evolução do passo de tempo δt_{min}^f ao longo da análise (caso 2).....	187
Figura 109: evolução do passo de tempo δt_{min}^{vp} ao longo da análise (caso 2).....	188
Figura 110: evolução da pressão de consolidação viscoplástica para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)	189
Figura 111: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)	189
Figura 112: evolução do Jacobiano viscoplástico na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)	190
Figura 113: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)	190
Figura 114: evolução do Jacobiano irreversível na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)	191
Figura 115: evolução da pressão de consolidação viscoplástica para diferentes valores do expoente n (caso 2).....	192
Figura 116: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica para diferentes valores do expoente n (caso 2).....	192
Figura 117: evolução do Jacobiano viscoplástico na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2).....	192
Figura 118: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2).....	193
Figura 119: evolução do Jacobiano irreversível na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2).....	193
Figura 120: geometria e condições de contorno do modelo térmico.....	194
Figura 121: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 3)	196

Figura 122: evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia (caso 3).....	198
Figura 123: evolução da norma das taxas de deformação plástica e viscoplástica na base da bacia (caso 3).....	199
Figura 124: evolução da porosidade na base da bacia (caso 3).....	199
Figura 125: evolução da temperatura na base da bacia (caso 3).....	200
Figura 126: evolução do coeficiente de viscosidade viscoplástico na base da bacia (caso 3)	200
Figura 127: evolução da viscosidade da água na base da bacia (caso 3).....	201
Figura 128: evolução da permeabilidade na base da bacia (caso 3).....	202
Figura 129: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 3).....	202
Figura 130: evolução da tensão efetiva vertical na base da bacia (caso 3).....	203
Figura 131: evolução da tensão efetiva horizontal na base da bacia (caso 3).....	203
Figura 132: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 3).....	204
Figura 133: evolução da relação tensão desviadora/tensão efetiva média na base da bacia (caso 3).....	205
Figura 134: evolução da pressão de consolidação na base da bacia (caso 3).....	205
Figura 135: evolução da massa específica na base da bacia (caso 3).....	206
Figura 136: evolução do módulo de Young na base da bacia (caso 3).....	206
Figura 137: evolução do módulo de compressão na base da bacia (caso 3).....	207
Figura 138: evolução do coeficiente de dilatação térmica α^s na base da bacia (caso 3).....	207
Figura 139: evolução do coeficiente de dilatação térmica α^ϕ na base da bacia (caso 3).....	207
Figura 140: evolução do coeficiente de Biot na base da bacia (caso 3).....	208
Figura 141: evolução do módulo de Biot na base da bacia (caso 3).....	208
Figura 142: evolução do calor específico na base da bacia (caso 3).....	209
Figura 143: evolução da condutividade térmica na base da bacia (caso 3).....	209
Figura 144: evolução da difusividade térmica na base da bacia (caso 3).....	210
Figura 145: evolução da difusividade líquida na base da bacia (caso 3).....	210
Figura 146: evolução dos passos de tempo Δt_{ref} na base da bacia (caso 3).....	211
Figura 147: perfil de Jacobiano irreversível na bacia (caso 3).....	212
Figura 148: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia (caso 3).....	212
Figura 149: perfil de porosidade na bacia (caso 3).....	213
Figura 150: perfil de temperatura na bacia (caso 3).....	214
Figura 151: perfil de poro-pressão na bacia (caso 3).....	215
Figura 152: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 3).....	216
Figura 153: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 3).....	216
Figura 154: perfil de coeficiente de difusividade térmica e líquida na bacia (caso 3).....	217

Figura 155: evolução do passo de tempo δt_{\min}^f ao longo da análise (caso 3).....	218
Figura 156: evolução do passo de tempo δt_{\min}^{vp} ao longo da análise (caso 3).....	219
Figura 157: evolução do passo de tempo δt_{\min}^t ao longo da análise (caso 3).....	219
Figura 158: evolução do número inteiro N ao longo da análise (caso 3).....	219
Figura 159: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	220
Figura 160: evolução da temperatura na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	221
Figura 161: evolução da norma da taxa de deformação plástica na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	222
Figura 162: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	222
Figura 163: σ'_v na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	223
Figura 164: σ'_H na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	223
Figura 165: K_0 na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	223
Figura 166: perfil de temperatura na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	224
Figura 167: perfil de Jacobiano irreversível na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	225
Figura 168: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	226
Figura 169: perfil de porosidade na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	227
Figura 170: perfil de poro-pressão na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	227
Figura 171: perfil de tensão efetiva média na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3).....	228
Figura 172: malha inicial (3D).....	231
Figura 173: ativação das camadas de sedimentos (3D).....	233
Figura 174: deslocamentos na direção x para $t=40$ Ma (3D).....	234
Figura 175: deslocamentos na direção y para $t=40$ Ma (3D).....	234
Figura 176: deslocamentos na direção z para $t=40$ Ma (3D).....	234
Figura 177: distribuição de porosidade para $t=40$ Ma (3D).....	235
Figura 178: distribuição de temperatura para $t=40$ Ma (3D).....	235
Figura 179: distribuição de poro-pressão para $t=40$ Ma (3D).....	235
Figura 180: distribuição de tensão efetiva média para $t=40$ Ma (3D).....	236

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 1)	151
Tabela 2: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 2)	173
Tabela 3: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 3)	197
Tabela 4: propriedades dos períodos de formação da bacia (3D).....	229
Tabela 5: características dos períodos de formação da bacia (3D).....	230
Tabela 6: coordenadas dos vértices da superfície superior de cada camada (3D).....	231
Tabela 7: solução isotérmica para diferentes discretizações espaciais (3D)	232
Tabela 8: solução isotérmica para diferentes discretizações temporais (3D).....	233

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
1.1 OBJETIVOS E DESENVOLVIMENTO DA PESQUISA	18
1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO	20
2 BACIAS SEDIMENTARES: ASPECTOS GERAIS	22
2.1 A ESTRUTURAÇÃO DA TERRA	22
2.1.1 Zonas composicionais	23
2.1.2 Zonas reológicas	24
2.2 TECTÔNICA DE PLACAS	25
2.2.1 Limite convergente	26
2.2.2 Limite divergente	27
2.2.3 Limite conservativo	28
2.2.4 Ciclo de Wilson	29
2.3 FORMAÇÃO DE BACIAS SEDIMENTARES	30
2.3.1 Processos de subsidência da litosfera	30
2.3.2 Deposição sedimentar	31
2.3.3 Classificação de bacias sedimentares	32
2.3.4 Processos de compactação	33
2.3.4.1 Compactação mecânica	35
2.3.4.2 Compactação químico-mecânica	36
2.3.5 Temperatura	37
3 MODELO POROMECÂNICO EM DEFORMAÇÕES FINITAS	40
3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA POROMECÂNICO	41
3.2 MODELO CONSTITUTIVO POROMECÂNICO	44
3.2.1 Modelo plástico	51
3.2.2 Modelo viscoplástico	55
3.2.3 Influência da porosidade sobre as propriedades poromecânicas	60
3.3 ELEMENTOS DA TERMOPOROMECÂNICA.....	63
3.3.1 Influência da porosidade sobre as propriedades térmicas	68
3.3.2 Influência da temperatura sobre as propriedades termoporomecânicas	70
3.3.2.1 Calor específico	71
3.3.2.2 Condutividade Térmica	73
3.3.2.3 Dilatação térmica.....	74
3.3.2.4 Módulo de Young.....	75

3.3.2.5 Coeficiente de viscosidade viscoplástica.....	76
3.3.2.6 Viscosidade da água	77
4 MODELO NUMÉRICO	80
4.1 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL.....	80
4.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL	86
4.2.1 Forma fraca da equação de equilíbrio.....	86
4.2.2 Forma fraca da equação de balanço de massa fluida.....	90
4.2.3 Forma fraca da equação de condução de calor.....	94
4.3 ASPECTOS COMPUTACIONAIS	95
4.3.1 Elementos utilizados e sistemas de equações.....	95
4.3.2 Estrutura de dados e processamento	98
4.3.2.1 Estrutura de dados	99
4.3.2.2 Solução do sistema de equações	100
4.3.3 Integração das deformações plásticas.....	103
4.3.4 Integração das deformações viscoplásticas	112
4.3.5 Integração simultânea das deformações plásticas e viscoplásticas	118
4.3.6 Aplicação à simulação de uma bacia sedimentar	119
4.3.7 Fluxograma do módulo térmico	124
4.3.8 Fluxograma do módulo poromecânico	126
4.3.9 Fluxograma geral do programa termoporomecânico	128
4.4 VALIDAÇÃO DA FERRAMENTA COMPUTACIONAL.....	131
4.4.1 Módulo térmico.....	131
4.4.2 Módulo poromecânico.....	133
4.4.2.1 Regime elástico infinitesimal: $0 \leq \delta \leq \delta^e$ ($0 \leq t \leq t^e$)	135
4.4.2.2 Regime elásto-plástico: $\delta^e \leq \delta \leq \delta^p$ ($t^e \leq t \leq t^p$)	136
4.4.2.3 Regime elásto-plástico-viscoplástico: $\delta^p \leq \delta \leq \delta^{vp}$ ($t^p \leq t \leq t^{vp}$)	137
4.4.2.4 Regime elásto-viscoplástico: $\delta^{vp} \leq \delta$ ($t^{vp} \leq t$)	141
4.4.2.5 Aplicação numérica	142
5 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS	145
5.1 SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO PURAMENTE MECÂNICA EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS	149
5.1.1 Caso 1: análise local.....	151
5.1.2 Caso 1: análise global	161
5.1.3 Caso 1: análise paramétrica	169
5.1.3.1 Taxa de deposição sedimentar.....	169

5.1.3.2 Permeabilidade	171
5.2 SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO MECÂNICA E QUÍMICO-MECÂNICA EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS.....	172
5.2.1 Caso 2: análise local.....	174
5.2.2 Caso 2: análise global	182
5.2.3 Caso 2: análise paramétrica	188
5.2.3.1 Parâmetro m	188
5.2.3.2 Expoente n	191
6 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS COM EFEITOS DA TEMPERATURA	194
6.1 PROBLEMA UNIDIMENSIONAL	194
6.1.1 Caso 3: análise local.....	198
6.1.2 Caso 3: análise global	211
6.1.3 Caso 3: análise paramétrica	220
6.1.3.1 Fluxo térmico: análise local.....	221
6.1.3.2 Fluxo térmico: análise global	224
6.2 EXEMPLO ILUSTRATIVO DE UM PROBLEMA TRIDIMENSIONAL	229
7 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	237
7.1 CONCLUSÕES	237
7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	245
REFERÊNCIAS	246
Apêndice A	260

1 INTRODUÇÃO

Bacias sedimentares são formadas quando uma determinada área da crosta terrestre é capaz de reter uma apreciável camada de sedimentos ao longo de um período de tempo geológico. Estes sedimentos tem origem na destruição de rochas (ígneas, sedimentares ou metamórficas) e são transportados e depositados em diferentes tipos de ambiente (continental, marinho ou transicional). O conjunto de processos físicos, químicos e biológicos pelos quais os sedimentos depositados se transformam em rocha é chamado de diagênese.

O estudo de bacias sedimentares é muito importante para a compreensão da história geológica do planeta, pois a investigação da estrutura e composição das camadas estratigráficas fornece informações preciosas sobre sua origem, geralmente associada a movimentações tectônicas que ocorreram há milhões de anos. São de grande importância econômica, pois a formação de hidrocarbonetos naturais como petróleo, gás e carvão ocorre quase que inteiramente dentro de rochas sedimentares. As bacias também podem formar importantes aquíferos e hospedar grande variedade de minérios como cobre, ouro, ferro e urânio.

A exploração destes recursos requer métodos cada vez mais sofisticados e vem evoluindo ao longo das últimas décadas. Grande parte disso se deve a indústria do petróleo, pois a necessidade de conhecimentos industriais em reservatórios levou a uma enorme expansão da pesquisa moderna sobre ambientes sedimentares. Hoje em dia é possível fazer previsões bastante detalhadas da localização de reservatórios de hidrocarbonetos através da combinação de seções de reflexão sísmica tridimensionais, registros elétricos e sondas de fundo de poço.

Neste sentido, a modelagem computacional de bacias sedimentares busca reconstruir o estado termoporomecânico das bacias a partir da simulação de eventos geológicos ocorridos ao longo de sua história. A previsão da redução de porosidade é uma das questões fundamentais, já que está associada a diversos fenômenos como a migração dos hidrocarbonetos, seu trapeamento e o desenvolvimento de poro-pressões. Ainda hoje, a avaliação da distribuição de porosidades continua a ser uma tarefa difícil que requer modelos constitutivos complexos para representar o comportamento do material sedimentar ao longo dos processos de deformação.

Do ponto de vista da análise mecânica, dois mecanismos de deformação tem papel dominante no processo de compactação dos sedimentos. A compactação puramente mecânica prevalece nas camadas superiores das bacias e ocorre devido à expulsão do fluido nos poros do material e conseqüente rearranjo das partículas sólidas, enquanto a compactação químico-mecânica resultante dos processos de pressão-solução intergranular é dominante nas camadas mais profundas, onde as tensões e temperaturas são maiores. No entanto, pode existir uma zona de transição onde estes fenômenos ocorrem de maneira simultânea e interdependente.

A avaliação da evolução térmica da bacia é de grande importância ao longo da sua história de formação, já que a temperatura modifica a viscosidade dos fluidos e as propriedades físico-químicas dos minerais, o que pode ter impacto significativo sobre os processos de deformação mecânica e químico-mecânica. No contexto da engenharia do petróleo, a investigação geotérmica da bacia também é muito importante, pois a produção de hidrocarbonetos é sensível a muitos fatores como a velocidade de aquecimento da rocha geradora, as temperaturas em que ela é aquecida e o tempo de exposição a estas temperaturas.

Uma das grandes dificuldades envolvidas na simulação da formação de bacias sedimentares é atribuída à grande mudança de porosidade ao longo do processo de compactação gravitacional. A natureza do problema deve ser entendida da seguinte forma: grandes deformações de caráter irreversível modificam a porosidade do material, levando a evolução da sua microestrutura e alterando suas propriedades termoporomecânicas, o que afeta a resposta global da bacia. Portanto, o modelo constitutivo do material sedimentar deve ser formulado mediante um acoplamento termoporomecânico no âmbito das grandes deformações.

A modelagem da compactação de sedimentos utilizando a teoria da consolidação foi primeiramente realizada por Gibson (1958), assumindo uma taxa de deposição sedimentar constante, uma única litologia e propriedades constantes para os sedimentos. A teoria é baseada na equação de consolidação para pequenas deformações de Terzaghi aplicada à análise da consolidação de depósitos superficiais do solo. Ainda hoje, modelos básicos para compactação mecânica são baseados nas relações fenomenológicas que relacionam a porosidade à tensão efetiva vertical de Terzaghi. Estes conceitos foram introduzidos inicialmente por Hubbert e Rubey (1959), e posteriormente por Smith (1971) e foram amplamente adotados e implementados por diversos autores em ferramentas computacionais via método dos elementos finitos que ajudaram a melhor compreender a evolução de bacias sedimentares.

Poucos trabalhos são dedicados na literatura recente para a modelagem teórica ou numérica destes fenômenos. Schneider e Hay (2001) desenvolveram um modelo macroscópico visco-elasto-plástico para simular a compactação mecânica e químico-mecânica de arenitos quartzosos. O modelo foi calibrado a partir de informações obtidas em dezessete poços e aplicado a formações da plataforma continental norueguesa de origem no Jurássico Médio. As simulações computacionais bidimensionais foram realizadas com o software Temispack. Zhao et al. (2001) desenvolveram um modelo de elementos finitos para simular a interação rocha-fluido em bacias sedimentares saturadas. O modelo simula as reações que ocorrem entre os compostos químicos do fluido e os minerais sólidos da rocha por meio de equações de transporte de massa que são resolvidas simultaneamente de maneira acoplada na ferramenta computacional.

Gutierrez e Wangen (2005) modelaram a compactação e o desenvolvimento de excesso de poro-pressão ao longo do período de deposição sedimentar em bacias do Mar do Norte. O modelo unidimensional descreve a porosidade como uma função da tensão efetiva vertical. Bernaud et al. (2006) desenvolveram um modelo constitutivo poroelastoplástico em grandes deformações e uma ferramenta computacional bidimensional via método dos elementos finitos para simular os processos de deposição e compactação mecânica em bacias sedimentares.

Buiter et al. (2009) estudaram a inversão de bacias sedimentares extensionais através de um modelo acoplado termo-mecânico com critério plástico de Drucker-Prager. Os processos de deposição e erosão sedimentar também são representados ao longo das simulações. Mello et al. (2009) desenvolveram um modelo de elementos finitos e utilizaram tetraedros para formar malhas não estruturadas e resolver numericamente alguns processos geológicos envolvidos na evolução de bacias sedimentares como deposição de sedimentos, geração de hidrocarbonetos, escoamento multi-fluidos e fluxo de calor em meios porosos.

Gunzburger (2010) investigou os fenômenos que levaram ao estado de tensão atual da bacia Leste de Paris a partir da modelagem numérica de rochas calcárias. Os resultados demonstraram que a relaxação associada a mecanismos de pressão-solução intergranular podem ser a possível explicação para os níveis de tensão e deformação encontrados. Os mecanismos de inversão tectônica da bacia da Panónia, na Europa Central, foram investigados por Jarosinski et al. (2011). Os autores utilizaram uma ferramenta computacional baseada no método dos elementos finitos para simular o comportamento dos sedimentos por meio de um modelo bidimensional em estado plano de deformação com acoplamento termo-elastoviscoplastico.

Duretz et al. (2016) utilizaram um modelo acoplado termo-mecânico bidimensional baseado no método das diferenças finitas para simular mecanismos que levaram ao processo de obdução do Ofiolito de Omã. Akaki et al. (2016) desenvolveram um modelo termo-químico-mecânico em grandes deformações e uma ferramenta computacional baseada no método dos elementos finitos para realizar simulações bidimensionais dos efeitos da variação de pressão causada por terremotos na fossa de Nankai sobre o comportamento de hidratos de metano.

1.1 OBJETIVOS E DESENVOLVIMENTO DA PESQUISA

O objetivo deste trabalho é desenvolver elementos para modelagem teórica e computacional de processos de deformação químico-poro-mecânicos e termo-poro-mecânicos em bacias sedimentares a fim de investigar alguns fenômenos fundamentais que ocorrem ao longo da diagênese. Com este propósito, foi desenvolvido um modelo constitutivo para um material poroso saturado e uma ferramenta numérica baseada no método dos elementos finitos para representar os processos de formação e compactação gravitacional de uma bacia sedimentar. Entre os fenômenos investigados estão o fluxo térmico, o fluxo de massa fluida e os processos de deformação mecânica e químico-mecânica da bacia.

O modelo constitutivo adotado como ponto de partida para este trabalho está apresentado em Maghous et al. (2014) e é resultado de pesquisas desenvolvidas por Bourgeois et al. (1995), Bourgeois e Dormieux (1997), Dormieux e Maghous (1999), Dormieux e Maghous (2000), Bernaud et al. (2002), Barthélémy et al. (2003), Deudé et al. (2004) e Bernaud et al. (2006) para representar o comportamento de um material sedimentar submetido à deformações de natureza puramente mecânicas. Trata-se de um modelo macroscópico de um material poroso saturado por um único fluido, definido no contexto da poroplasticidade finita, que leva em conta a evolução das propriedades poromecânicas em função das mudanças de caráter irreversível que ocorrem na sua microestrutura. O comportamento plástico do material é definido pelo modelo Cam-Clay modificado em conjunto com uma lei de encruamento logarítmica desenvolvida segundo uma abordagem micromecânica que evita o desenvolvimento de porosidade negativa no material quando este é submetido a altos níveis de tensão confinante.

Com o intuito de representar as deformações químico-mecânicas que ocorrem nas camadas mais profundas da bacia, novos termos são introduzidos nas equações de estado do material.

Os fenômenos de pressão-solução intergranular são simulados com um modelo viscoplástico baseado no princípio da teoria de Perzyna (1966) em conjunto com uma regra de fluxo associada definida pelo modelo Cam-Clay modificado, e uma lei de encruamento obtida segundo uma abordagem fenomenológica. O comportamento plástico e viscoplástico são acoplados para representar a natureza interdependente das deformações mecânicas e químico-mecânicas.

Os efeitos da temperatura são incorporados no modelo constitutivo a partir de um acoplamento parcial. Enquanto a temperatura atua diretamente sobre o comportamento do material através de termos adicionados nas equações de estado poromecânicas, os termos relativos às deformações e variações de pressão são desconsiderados na equação de balanço de entropia. Desta forma, a evolução das temperaturas na bacia é obtida a partir da solução de um problema de condução térmica. Os efeitos poromecânicos são considerados no problema de evolução térmica através das modificações da geometria e das propriedades térmicas do material que ocorrem ao longo do processo de deformação.

Uma característica fundamental do modelo está relacionada à mudança das propriedades do material poroso em função da variação de temperatura e da evolução de caráter irreversível da sua microestrutura. A evolução destes parâmetros em função da porosidade é determinada por meio de leis de homogeneização obtidas de abordagens variacionais e estimativas micromecânicas, enquanto que os efeitos térmicos são determinados em função de modelos desenvolvidos a partir de observações de experimentos realizados em laboratório.

A ferramenta computacional é desenvolvida baseada no método dos elementos finitos com uma interface de multiprocessamento em memória compartilhada. São utilizados elementos hexaédricos para representar as incógnitas que definem o problema termoporomecânico: deslocamentos, pressões e temperaturas. Os processos de deposição/erosão sedimentar são simulados a partir de um algoritmo de ativação/desativação de elementos. Um módulo térmico e um módulo poromecânico são desenvolvidos e validados separadamente a partir de soluções analíticas. O funcionamento do programa termoporomecânico ocorre por meio da interação do módulo de deposição/erosão sedimentar e dos módulos térmico e poromecânico.

As simulações numéricas são realizadas a partir de um cenário geológico simplificado. O modelo computacional é formado por uma coluna de elementos finitos em condições oedométricas, o que corresponde a um problema de evolução unidimensional associado a uma bacia com extensões laterais infinitas. Este domínio geométrico representa um ambiente oceânico,

onde ao longo de dezenas de milhões de anos ocorre um significativo evento de deposição sedimentar. Um fluxo térmico ascendente é aplicado na base do modelo para representar o calor produzido e conduzido pelas camadas que se encontram abaixo do assoalho oceânico. Conforme o processo de compactação gravitacional avança, são reproduzidas diferentes etapas observadas ao longo da diagênese. A capacidade da ferramenta computacional de representar problemas tridimensionais complexos é demonstrada a partir de uma história de deposição sedimentar associada a camadas estratigráficas com espessuras variáveis.

1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO

O trabalho é dividido em sete capítulos. Cabe a este primeiro introduzir o tema proposto, sua importância no contexto mundial e de que forma o assunto encontra-se abordado atualmente pelos pesquisadores. O capítulo apresenta também os objetivos da pesquisa e a forma como as diferentes etapas de desenvolvimento da tese foram realizadas.

O segundo capítulo busca explicar questões básicas sobre a geologia da Terra e os diferentes fenômenos envolvidos na formação de bacias sedimentares. São apresentadas as diferentes zonas composicionais e reológicas do planeta, a teoria da tectônica de placas e os tipos de limites existentes, necessários para a compreensão da formação de ambientes propícios à acumulação de sedimentos. São fornecidas informações sobre a formação de bacias sedimentares: os processos de subsidência da litosfera, os processos de deposição e compactação dos sedimentos e a importância da temperatura ao longo da diagênese.

O terceiro capítulo utiliza a formulação tensorial para apresentar o modelo constitutivo do material sedimentar a partir de uma abordagem macroscópica no contexto da mecânica dos meios porosos, onde este é abordado como uma superposição de dois meios contínuos. As equações de equilíbrio, balanço de massa fluida e balanço de entropia são apresentadas, assim como as relações constitutivas do material e todas as especificidades do modelo, como a plasticidade e a viscoplasticidade, o acoplamento termoporomecânico e as leis de evolução das propriedades termoporomecânicas em função da temperatura e da microestrutura do material.

O quarto capítulo aborda os desenvolvimentos numéricos da tese, onde é descrita toda formulação necessária para elaboração da ferramenta computacional através do método dos elemen-

tos finitos. As discretizações temporal e espacial são apresentadas, e a forma fraca das equações de campo é trabalhada passo a passo para chegar aos sistemas de equações resultantes, onde as incógnitas são os deslocamentos e as variações de poro-pressão e temperatura. Diversos aspectos computacionais são apresentados: os elementos finitos hexaédricos, a estrutura de dados, a interface de multiprocessamento, os métodos de solução dos sistemas de equações, os algoritmos de integração das deformações plásticas e viscoplásticas, o algoritmo de simulação do processo de deposição sedimentar, os fluxogramas do módulo térmico e poromecânico, e o fluxograma geral do programa acoplado termoporomecânico.

O quinto capítulo apresenta as simulações numéricas realizadas em condições isotérmicas. Um problema de formação e compactação gravitacional de uma bacia sedimentar é proposto a fim de investigar a evolução do modelo constitutivo e o comportamento global da estrutura. São apresentados um caso de compactação puramente mecânica e um caso em que ocorrem ambos os processos de compactação mecânica e químico-mecânica. Diversos aspectos do modelo constitutivo e do comportamento da bacia são amplamente analisados.

No sexto capítulo as simulações computacionais do problema proposto no capítulo 5 são realizadas em condições não-isotérmicas. Os efeitos da temperatura sobre o comportamento da bacia são investigados e os resultados obtidos são ilustrados e comparados com as análises anteriores. Um problema de compactação gravitacional tridimensional referente a uma situação puramente acadêmica é proposto para ilustrar a capacidade da ferramenta computacional em simular problemas de evolução 3D. Os resultados são brevemente apresentados.

O sétimo capítulo trata das considerações finais, onde são expostas as conclusões sobre tudo o que foi desenvolvido ao longo deste trabalho. É feita uma breve descrição das contribuições científicas da tese, juntamente com uma análise crítica a respeito de diversos aspectos da modelagem teórica e computacional proposta. As simulações numéricas são expostas e uma breve análise é realizada sobre os resultados obtidos. Por fim, o capítulo apresenta algumas sugestões para desenvolvimentos futuros no contexto da modelagem de bacias sedimentares.

2 BACIAS SEDIMENTARES: ASPECTOS GERAIS

Antes de abordar os conceitos fundamentais da mecânica dos meios porosos e apresentar o modelo constitutivo utilizado nas simulações numéricas é importante introduzir previamente noções gerais relativas à formação de bacias sedimentares. O principal objetivo do presente capítulo é fornecer uma descrição básica dos diferentes processos que envolvem este tema.

2.1 A ESTRUTURAÇÃO DA TERRA

O interior da Terra é composto por diversas zonas. Estas costumam ser classificadas de duas diferentes formas: composicionais e reológicas (ou mecânicas). As principais zonas composicionais são o núcleo, o manto e a crosta, que corresponde à parte mais externa, composta por rochas de densidade relativamente baixa cobertas por camadas de sedimentos. As divisões reológicas não coincidem necessariamente com as divisões composicionais. Um limite reológico fundamental situa-se entre a astenosfera e a litosfera, que compreende a camada mais externa, composta por um número de placas que se encontram em movimento em relação umas às outras (ALLEN; ALLEN, 2005). A Figura 1 apresenta uma seção da Terra e suas diferentes camadas segundo os dois tipos de classificação.

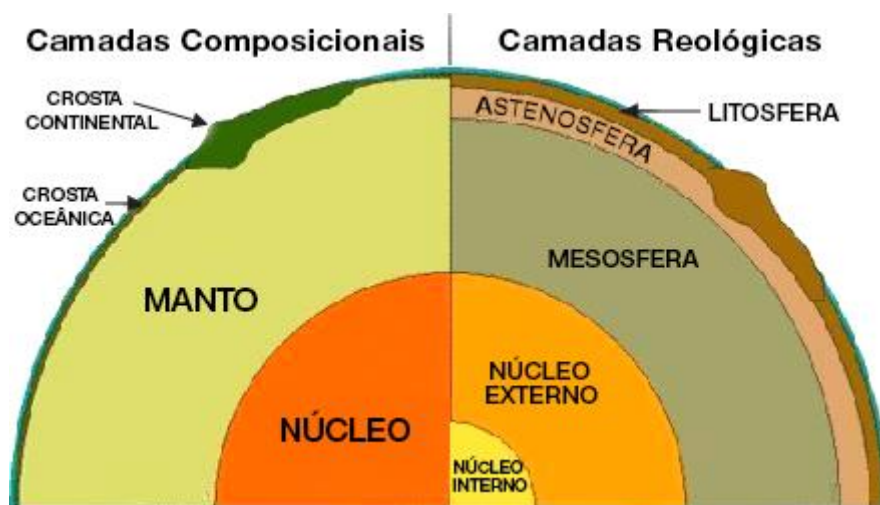


Figura 1: camadas composicionais e reológicas da Terra (FAS, 2016)

2.1.1 Zonas composicionais

A crosta oceânica ocupa cerca de 60% da superfície da Terra. Ela costuma ser mais fina e mais densa do que a maior parte da crosta continental, variando entre 4 a 50 km de espessura. Sua composição é basáltica com densidade média em torno de 2900 kg/m^3 . Comparada com a crosta continental, a crosta oceânica tem uma vida útil muito curta. Como a crosta oceânica vai resfriando com o passar do tempo, chega-se a um momento em que ela se torna instável gravitacionalmente em relação ao manto, e como resultado disto ela é consumida. Isto explica por que a mais antiga crosta oceânica nos dias de hoje é tão jovem como o período Jurássico (até 200 milhões de anos).

A espessura da crosta continental varia entre 30 a 80 km, mas com uma espessura média de 35 km. Originalmente pensava-se que ela era dividida em duas camadas com composições e densidades diferentes. A camada superior com propriedades físicas semelhantes às de granitos, recoberta por uma fina camada de rochas sedimentares, com espessura entre 20 e 25 km e densidade de 2500 a 2700 kg/m^3 . A camada inferior é composta principalmente por gabros e granitos com densidade de 2800 a 3100 kg/m^3 . Na realidade, estas camadas podem não ser tão bem definidas assim, e em vez disso, pode existir uma variação mais contínua da composição ao longo da profundidade. Normalmente, o limite da crosta continental superior e inferior é dado pela descontinuidade de Conrad.

Informações sobre a densidade destas rochas foram obtidas através de observações das velocidades de ondas sísmicas através de diversas camadas crustais, juntamente com análise das propriedades físicas de materiais coletados e dados experimentais. A fronteira entre a crosta e o manto é chamada de descontinuidade de Mohorovicic (ou Moho), nome atribuído ao geofísico croata Andrija Mohorovicic que a sugeriu no início do século XX. O Moho corresponde a uma profundidade onde as ondas sísmicas aumentam significativamente de velocidade, relacionada a uma mudança na densidade e na composição química das rochas. Trata-se de uma descontinuidade composicional e não reológica do planeta.

Abaixo desta descontinuidade está o manto. O manto é dividido em duas camadas: manto superior e manto inferior. O manto superior estende-se até aproximadamente 680 km de profundidade e é marcado por transições de fase, entre sólida e líquida. O manto inferior estende-se até o limite exterior do núcleo, a 2900 km, com um aumento de sua densidade ao longo da profundidade (ALLEN; ALLEN, 2005).

2.1.2 Zonas reológicas

No que diz respeito ao estudo de bacias sedimentares, é importante a diferenciação entre duas zonas reológicas do planeta: a litosfera e a astenosfera. Isto porque os movimentos verticais de subsidência e soerguimento que ocorrem em bacias sedimentares podem ser consequências de diversos processos mecânicos e térmicos na litosfera, mudanças de fase no manto e interação entre a litosfera e a astenosfera.

A litosfera é uma casca segmentada que compreende a crosta e uma parte do manto superior. Sua espessura pode ser definida a partir de diversos métodos, como através de velocidades de ondas sísmicas (KANAMORI; PRESS, 1970; GAHERTY et al. 1999), da determinação do hipocentro de terremotos (JACKSON, 2002), e de perfis de velocidade de deslocamento horizontal das placas ao longo de sua profundidade (KARATO, 2008).

No entanto, os conceitos mais utilizados na definição da sua espessura são mecânicos e térmicos. A rigidez da litosfera permite que ela se comporte como uma placa, mas somente sua parte superior é suficientemente rígida para reter tensões elásticas em escala de tempo geológico (milhões de anos). Esta camada é definida como a litosfera elástica. Abaixo dela há uma camada macia que permite a relaxação das tensões elásticas, mas que é suficientemente rígida para constituir uma parte da placa da superfície (WALCOTT, 1970; PELTIER, 1984). Do ponto de vista térmico, acredita-se que a base da litosfera é delimitada por uma zona isotérmica entre 1100 e 1330°C, onde as rochas do manto aproximam-se de sua temperatura sólida (PARSON; SCLATER, 1977; POLLACK; CHAPMAN, 1977). Portanto, os diferentes conceitos levam a diferentes resultados na determinação da espessura das litosferas oceânicas e continentais.

A astenosfera é a camada que se situa logo abaixo da litosfera. Com temperaturas mais elevadas, possui menor rigidez, sendo capaz de sofrer deformações de uma forma relativamente fácil. Pode ser considerada como um fluido viscoso para longos períodos (tempo geológico) e como um sólido elástico para curtos intervalos de tempo, como por exemplo, para a passagem das ondas sísmicas (minutos a segundos). A subsidência da litosfera através de efeitos mecânicos e térmicos provenientes da astenosfera proporcionam ambientes favoráveis à formação de bacias sedimentares. Para entender melhor estes mecanismos deve-se primeiro conhecer alguns fundamentos da teoria da tectônica de placas.

2.2 TECTÔNICA DE PLACAS

A idéia básica da teoria da tectônica de placas foi proposta por Jason Morgan em 1968. Trata-se de um modelo que procura explicar a origem de padrões de deformação da crosta terrestre, distribuição de terremotos, deriva continental, formação de dorsais oceânicas, e também mecanismos de resfriamento da Terra. As duas maiores premissas da tectônica de placas são: 1) a litosfera se comporta como um corpo rígido repousando sobre a astenosfera; 2) a litosfera é segmentada em várias placas que estão em movimento e estão continuamente mudando de forma e tamanho (CONDIE, 1997).

O conceito dos movimentos relativos das placas que constituem a litosfera vem de estudos de grandes terremotos e observações da distribuição de seus epicentros, assim como de estudos magnéticos realizados sobre bacias oceânicas. A taxa e a forma como as placas se movimentam relativamente umas as outras governam muitos aspectos do ambiente geodinâmico das bacias sedimentares (MINSTER; JORDAN, 1978). Diferentes informações podem ser encontradas na literatura a respeito da velocidade relativa e absoluta em que as placas se movem.

Por meios de comparações de anomalias magnéticas, DeMets et al. (1990) estimaram as velocidades médias de algumas placas correspondente aos últimos 3 milhões de anos. Os valores obtidos foram: 15-20 mm/ano para a placa Norte Americana, 24-27 para Euro-Asiática, 29-32 para Africana, 60-75 para a placa Australiana e 50-70 mm/ano para a placa do Pacífico. Carson (1977) relata que a placa de Juan de Fuca está entrando sob a placa Norte Americana a uma velocidade aproximada de 26 mm/ano.

Segundo Wilson (1993), a velocidade das placas permanece praticamente constante ao longo de períodos na ordem de milhões de anos. Komatina (2004) afirma que a taxa média de movimentos recentes das placas é de 1 a 2 mm/ano. Para Cloetingh et al. (1984), a velocidade característica de litosferas oceânicas atualmente é da ordem de 10 mm/ano. Em seu modelo numérico, Buitter et al. (2009) estudaram a inversão de bacias aplicando 10 mm/ano de velocidade para movimentos tectônicos compressivos. Jarosinski et al. (2011) simularam o mecanismo de inversão tectônica da bacia da Panónia a partir da velocidade de 1 mm/ano.

Existem três tipos de limites de placas, caracterizados pelo modo como as placas se deslocam umas em relação às outras, aos quais estão associados diferentes tipos de fenômenos de superfície. Os três tipos de limites são: convergente, divergente e conservativo.

2.2.1 Limite convergente

Trata-se de um limite destrutivo, onde o encontro das margens convergentes provoca a subducção da placa mais densa e sua posterior destruição na astenosfera (LEEDER, 1999). Pode-se diferenciar dois tipos de limites convergentes. O primeiro chamado de limite de subducção, quando a litosfera oceânica constitui a placa que mergulha sob a outra, como nos casos de limites oceânico-oceânicos e limites oceânico-continentais. Nos encontros oceânico-continentais, como o material constituinte da placa oceânica é mais denso que o da placa continental, é esta a placa que acaba sendo consumida. O segundo é o chamado limite colisional, quando a litosfera continental constitui a placa que mergulha sob a outra. Este tipo de fenômeno costuma ocorrer em convergências do tipo continental-continental e leva a uma deformação intensa e generalizada. Em situações raras, a litosfera oceânica pode passar por cima da litosfera continental, como no caso da ilha de Taiwan.

A Figura 2 apresenta o fenômeno de convergência entre placas oceânicas. Este tipo de convergência leva a formação de uma fossa oceânica bem desenvolvida e de ilhas vulcânicas. Um exemplo disto são as Ilhas Marianas, formadas pelo encontro das placas tectônicas do Pacífico e das Filipinas. A Figura 3 ilustra uma convergência do tipo oceânica-continental, levando a formação de uma fossa oceânica associada a um arco magmático continental com intensa atividade vulcânica. Este fenômeno formou a Cordilheira dos Andes, através do encontro das placas Nazca e Sul-Americana. A Figura 4 ilustra o fenômeno de convergência entre placas continentais, como é o caso da formação da Cordilheira do Himalaia, quando as placas Índica e Euro-Asiática colidiram (ALLEN; ALLEN, 2005).

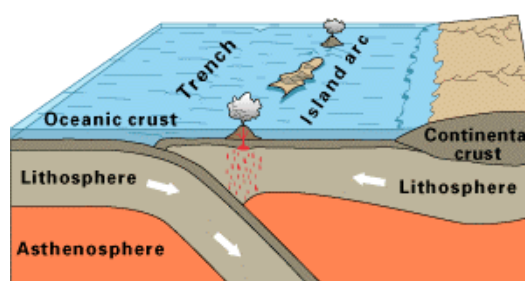


Figura 2: convergência oceânica-oceânica (GEOWIKI, 2016)

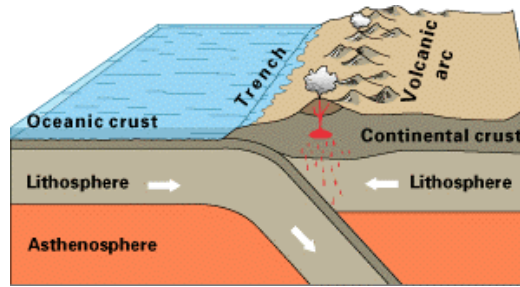


Figura 3: convergência oceânica-continental (GEOWIKI, 2016)

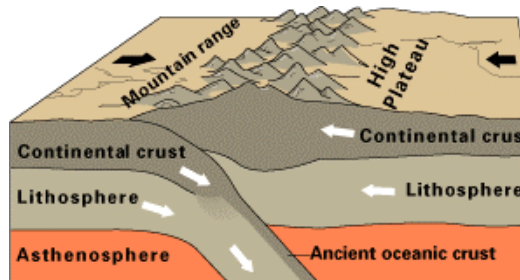


Figura 4: convergência continental-continental (GEOWIKI, 2016)

2.2.2 Limite divergente

Trata-se de um limite construtivo. Com a separação das margens divergentes, uma nova crosta é criada pelo magma empurrado para cima a partir do manto. O mais conhecido exemplo deste fenômeno é o da criação do Oceano Atlântico. A Figura 5 ilustra este fenômeno.

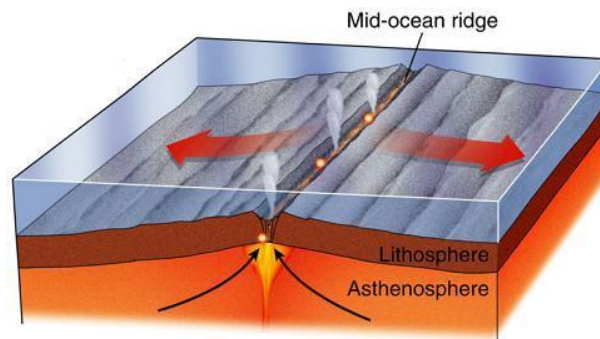


Figura 5: divergência tectônica (QUIZLET, 2016)

2.2.3 Limite conservativo

No caso do limite conservativo, placas adjacentes deslocam-se paralelamente umas às outras formando falhas transformantes. A falha de San Andreas que passa pela Califórnia é um exemplo de deslocamento paralelo relativo entre as placas do Pacífico e Norte-Americana. A Figura 6 ilustra um movimento transformante entre placas paralelas.

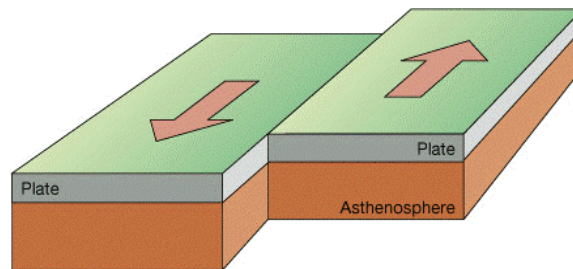


Figura 6: movimento transformante entre placas (THINGLINK, 2016)

A Figura 7 ilustra de forma simplificada a divisão atual das placas tectônicas ao redor do planeta e os tipos de limites existentes entre elas atualmente.

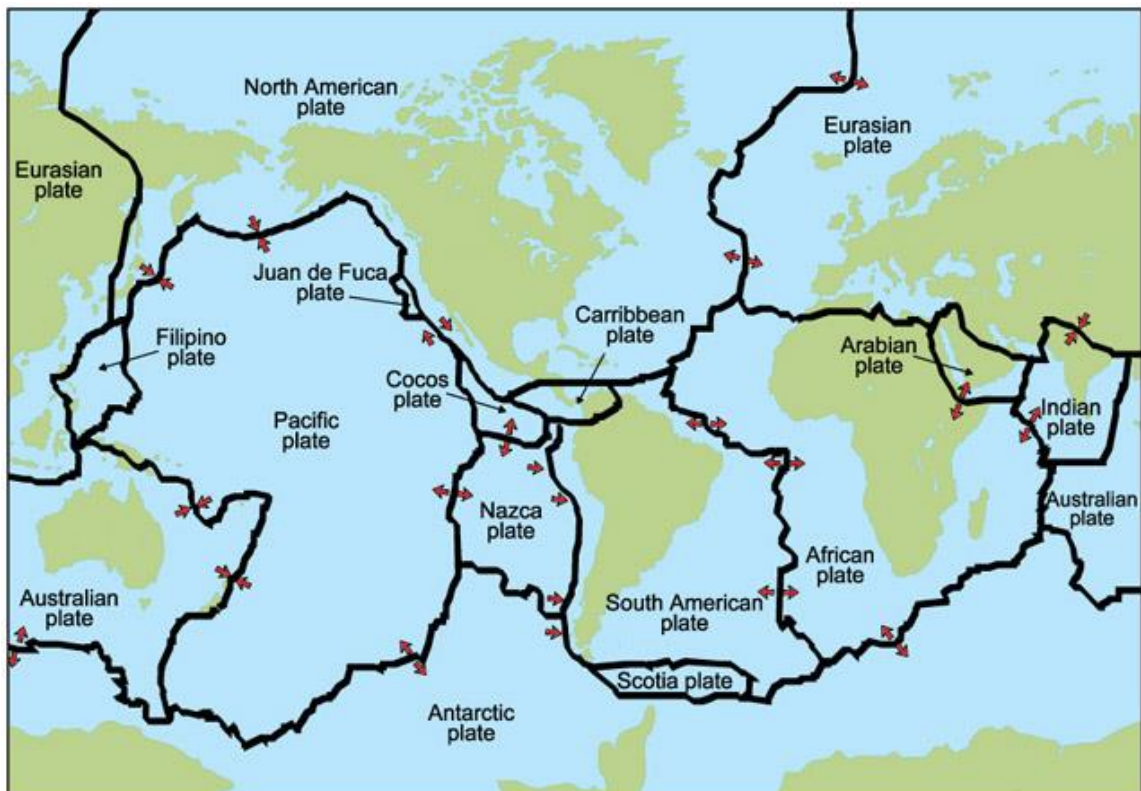


Figura 7: divisão das placas tectônicas (SOUTHUSEARTHQUAKERISK, 2016)

2.2.4 Ciclo de Wilson

O movimento relativo das placas com fenômenos construtivos, conservadores e destrutivos, cria um quadro contínuo de mudanças, com separação continental, criação de bacia oceânica, fechamento de oceano e colisão continental. O ciclo do movimento de placas que envolve a abertura e fechamento de oceanos é chamado ciclo de Wilson, baseado em idéias iniciais do processo de abertura e fechamento do oceano Atlântico por John Tuzo Wilson (WILSON, 1966). Muitas bacias sedimentares podem ser relacionadas a uma fase específica deste ciclo.

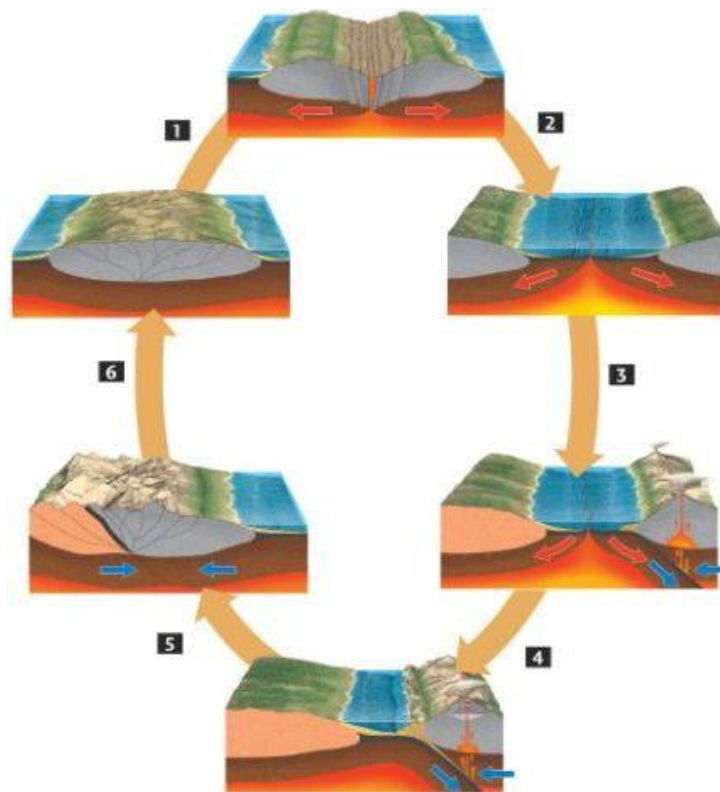


Figura 8: ciclo de Wilson (TES, 2016)

A Figura 8 ilustra as diferentes etapas do ciclo de Wilson: 1) o bloco continental começa a se separar a partir de movimentos extensionais da litosfera e começa o processo de formação de um rifte; 2) este segue se abrindo a partir de movimentos divergentes e forma uma bacia oceânica; 3) devido à maior densidade, a litosfera oceânica começa a sofrer subducção ao formar um limite convergente com a litosfera continental; 4) a bacia oceânica começa a se fechar; 5) quando dois continentes colidem, o processo de orogênese engrossa a espessura da crosta formando uma cadeia de montanhas; 6) com o passar do tempo o continente sofre processos de erosão que levam ao afinamento da sua espessura.

2.3 FORMAÇÃO DE BACIAS SEDIMENTARES

Uma bacia sedimentar é o resultado do processo de subsidência da litosfera, que proporciona um ambiente favorável à deposição e preservação de uma espessa camada de sedimentos. Estes sedimentos podem ser originados de rochas ígneas, metamórficas e sedimentares, e são transformados em rochas por meio da diagênese. O fenômeno da diagênese pode ser definido como todo processo físico, químico e biológico que age sobre um sedimento desde o momento em que foi depositado até que entre no domínio do metamorfismo (GILES, 1997).

2.3.1 Processos de subsidência da litosfera

A subsidência da litosfera terrestre costuma acontecer principalmente devido aos seguintes processos mecânicos e térmicos: 1) afinamento da crosta devido ao estiramento causado por movimentos tectônicos ou erosão; 2) espessamento da litosfera durante o seu resfriamento; 3) carregamento sedimentar e vulcânico; 4) carregamento tectônico; 5) carregamento crustal devido a empurrões; 6) efeitos dinâmicos do fluxo da astenosfera; 7) densificação crustal devido a mudanças de pressão ou temperatura (BUSBY; INGERSOLL, 1995).

A subsidência mecânica pode ser local ou regional. A subsidência mecânica local é típica dos estágios iniciais de bacias marginais, resultante da ruptura crustal. A subsidência mecânica regional ocorre quando uma carga é acrescida à superfície da placa, que sofre subsidência por flexão devido à compensação isostática (WATTS, 2001). Este fenômeno ocorre principalmente em bacias de antepaís, mas corresponde também à componente da própria carga sedimentar depositada sobre uma bacia, amplificando os demais processos de subsidência.

A subsidência térmica resulta também do processo de compensação isostática. A distensão de uma placa litosférica leva ao seu afinamento e a ascensão do topo da astenosfera, implicando no aumento da sua temperatura. Com o passar do tempo, a litosfera tende a resfriar e retornar à situação original. Isso se dá pelo rebaixamento do topo da astenosfera devido ao esfriamento e adensamento das rochas do manto. Tal adensamento corresponde a uma carga que induz à subsidência flexural da placa por isostasia. Este processo geralmente tem caráter regional, sendo típico da fase de deriva continental (SOUZA-LIMA; HAMSI, 2003).

2.3.2 Deposição sedimentar

Muito do que acontece com o sedimento durante o curso da diagênese é determinado pelas suas propriedades iniciais, tais como sua composição, tamanho de grão, porosidade e permeabilidade. Estas e outras informações fazem parte da sedimentologia, que pode ser definida como o estudo do transporte e deposição de sedimentos, de forma a prover informações para que se possa interpretar as rochas sedimentares (GILES, 1997).

O roteamento de sedimentos é o sistema geomorfológico que envolve a liberação, transporte e deposição de sedimentos. Compreender este sistema complexo em termos de suas leis físicas e tempos de resposta é importante para a avaliação do fornecimento de sedimentos para bacias sedimentares. O ciclo da água é um dos principais fenômenos globais envolvidos no fornecimento dos sedimentos erodidos em terra para o mar. Continentes e oceanos trocam água continuamente. Sendo a precipitação em terra superior a sua evaporação, o excesso retorna ao oceano como escoamento superficial. É este escoamento o responsável pelo transporte de sedimentos da terra para os oceanos (LEEDER, 1999).

Existem duas estratégias para avaliar o rendimento de captação média de sedimentos: o uso da taxa de preenchimento de lagos naturais e reservatórios artificiais, e o cálculo do volume de sedimento acumulado em bacias sedimentares. Embora haja uma enorme variabilidade em torno destes valores, estima-se que a produção média global de sedimentos seja de 135 ton/km² por ano e que a quantidade total de sedimentos descarregados para o oceano é da ordem de 2×10^{10} toneladas por ano (ALLEN; ALLEN, 2005).

A taxa de deposição sedimentar é outra informação de grande importância na modelagem e reconstrução da história de bacias sedimentares. Segundo Stephenson (1996), pode-se considerar 0.05 mm/ano uma taxa de deposição típica para bacias marginais ou por grandes falhas. Em suas pesquisas, Zuo et al. (1997) estimaram uma taxa de deposição de sedimentos na porção noroeste do Mar Mediterrâneo variando de 0.1 a 6 mm/ano a partir de técnicas de análise de concentrações de chumbo. Para simular a bacia do Mar do Norte próximo à Inglaterra, Gutierrez e Wangen (2005) utilizaram uma taxa de deposição de 0.025 mm/ano. Enquanto Ingall e Cappellen (1990) constatam que a taxa atual de deposição sedimentar em ambientes marinhos varia entre 0.0014 a 25 mm/ano, Bjorlykke (2010) afirma que em áreas centrais do Oceano Atlântico, ela varia entre 0.001 a 0.01 mm/ano.

Um banco de dados com a espessura de sedimentos atual nos oceanos foi compilado pela *National Geophysical Data Center* (DIVINS, 2003) e atualizado com informações do oceano Antártico por Whittaker et al. (2013). A Figura 9 apresenta o resultado destes trabalhos.

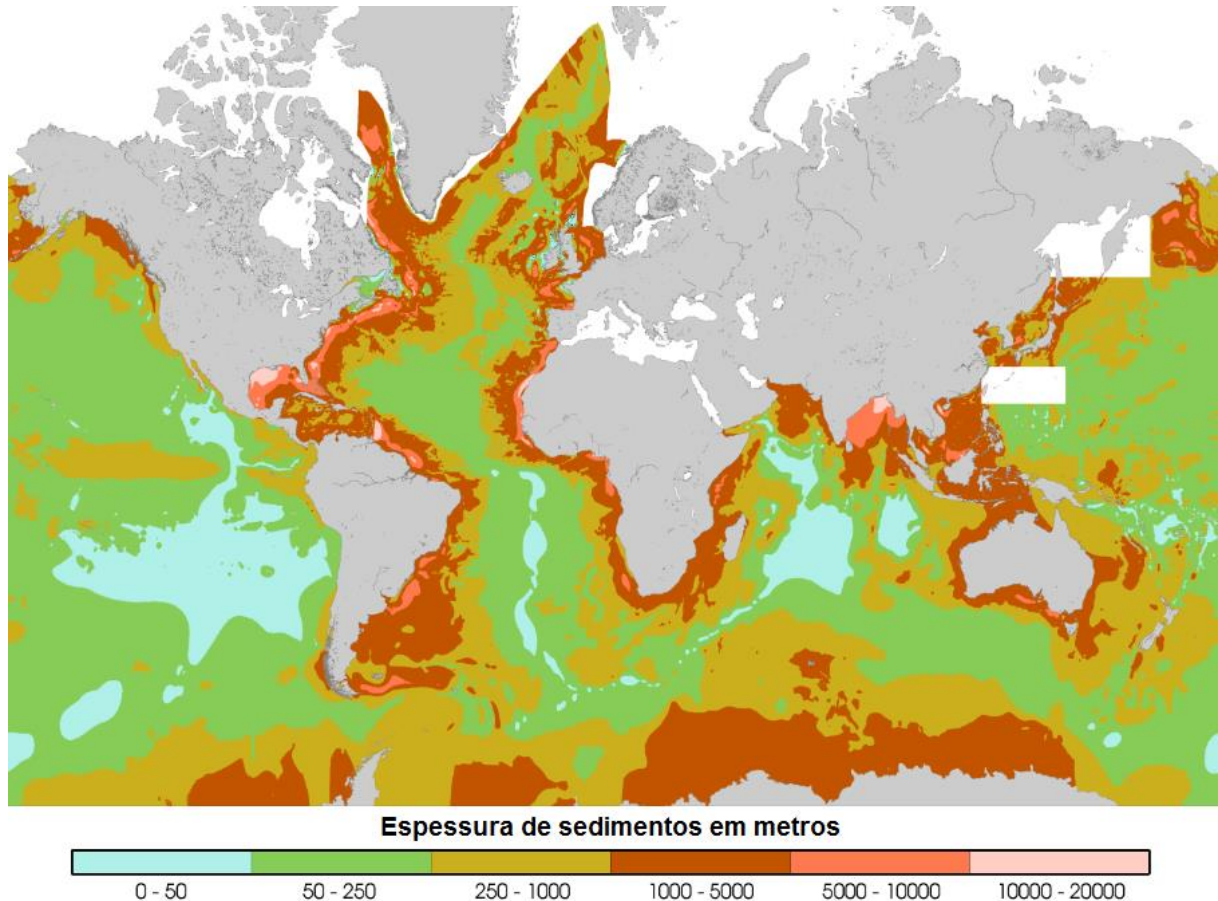


Figura 9: espessura de sedimentos atual nos oceanos (Whittaker et al. 2013)

2.3.3 Classificação de bacias sedimentares

Cada bacia tem sua própria história, ligada a uma determinada combinação de interações de tectônica de placas e condições deposicionais. No entanto, organizar as centenas de bacias sedimentares existentes no mundo é fundamental para que seja possível entender os diferentes processos termoporomecânicos e estilos estruturais envolvidos em suas gêneses e a influência destes na distribuição de recursos naturais.

Existem diversas formas de classificar os diferentes tipos de bacias sedimentares. De uma forma geral, esquemas recentes de classificação das bacias são baseados no trabalho de Dickinson (1974), que determinou que a classificação de uma bacia sedimentar deve ser realizada de acordo com três fatores chaves: 1) tipo de substrato (crosta continental, oceânica ou de transição); 2) proximidade dos limites da placa; 3) tipo de limite de placa mais próximo (convergente, divergente ou transformante).

Neste trabalho se optou por não apresentar nenhum quadro de classificação, já que apenas conceitos básicos foram apresentados ao longo deste capítulo, buscando proporcionar uma visão geral da formação das bacias sedimentares para uma melhor compreensão do objetivo proposto. Para apresentar um quadro completo de classificação, outros fenômenos geológicos teriam de ser descritos de forma mais específica, fugindo do escopo deste trabalho.

2.3.4 Processos de compactação

O processo de compactação de uma bacia sedimentar envolve diversos processos geológicos que compreendem fenômenos mecânicos, químicos, térmicos e biológicos. Estes fenômenos podem atuar de forma simultânea, afetando diretamente uns aos outros. Do ponto de vista da análise mecânica, dois mecanismos de deformação tem papel dominante no processo de compactação dos sedimentos: 1) compactação puramente mecânica, que envolve principalmente o rearranjo entre as partículas dos sedimentos; 2) compactação químico-mecânica, resultante de mecanismos de pressão-solução induzido por tensões (Schneider et al. 1996; GUTIERREZ; WANGEN, 2005; ZHANG; SPIERS, 2005).

As deformações puramente mecânicas prevalecem nas camadas superiores das bacias, enquanto que as deformações químico-mecânicas são dominantes nas camadas mais profundas, onde as tensões e temperaturas são maiores. No entanto, pode existir uma zona de transição onde as deformações mecânicas e químico-mecânicas podem se comportar como processos fortemente interdependentes. Esta zona de transição pode estar localizada a uma profundidade de algumas centenas de metros para sedimentos carbonáticos, e cerca de 1.5 km para arenitos. Abaixo desta zona de transição, os mecanismos de pressão-solução controlam o processo de deformação da bacia (SCHMIDT; MCDONALD, 1979; ANGEVINE; TURCOTTE, 1983; TADA; SIEVER, 1989; Renard et al. 1999; YANG, 2000; HU; HUECKEL, 2007).

Diversas pesquisas foram realizadas para descrever a contribuição de cada processo de deformação à história de perda de porosidade em bacias sedimentares. Para alguns autores, a deformação mecânica sozinha pode reduzir a porosidade para valores mínimos em torno de 25% e mesmo cargas extremas causadas pela tectônica de placas não seriam suficientes para atingir os baixos níveis de porosidade encontrados em algumas amostras de bacias. Para outros, a porosidade não diminui abaixo de 30-35%, onde a compactação química não foi um processo ativo (BOER, 1977; Schneider et al. 1996; BJORLYKKE, 2014).

Hedberg (1936) publicou um estudo sobre o processo pelo qual uma argila é consolidada e litificada para formar um folhelho. Seus conceitos podem ser resumidos em quatro etapas. A primeira etapa é caracterizada pelo rearranjo mecânico dos grãos e ocorre com porosidades na faixa de 75% a 90%. Quando uma camada de sedimentos com alta porosidade é submetida à pressão gravitacional, o fluido contido nos poros é primeiramente expulso como consequência de um rearranjo mecânico das partículas. Algum fluido adsorvido é perdido. A segunda etapa ocorre com porosidades entre 35% a 75%. A expulsão do fluido continua. O fluido adsorvido se move dos pontos de maior tensão, na região de contato entre os grãos, para poros maiores. Com o contínuo aumento da pressão, o limite inferior deste processo é atingido quando os grãos começam a entrar em contato uns com os outros. Apenas uma pequena quantidade de fluido adsorvido permanece, e quase todo fluido contido nos poros já foi expulso.

A terceira etapa caracteriza-se pela deformação mecânica e acontece entre porosidades de 10% a 35%. As partículas já estão em contato e a consolidação só pode acontecer com a alteração da forma dos grãos. Este é um processo mecânico com flexão, esmagamento e granulação das partículas. Mais fluido adsorvido é expulso, e o reajuste químico começa. A quarta etapa é o estágio de recristalização, abrangendo porosidades de 0% a 10%. O reajuste químico se torna o fator dominante. O volume total é reduzido pela formação de minerais mais densos e os poros são preenchidos por estes novos minerais e sua cimentação. Este processo ocorre com grandes pressões e altas temperaturas nas profundidades do oceano.

Uma pergunta pertinente a respeito desta sequência de consolidação é em que momento o sedimento argiloso se torna um folhelho. Esta transição, de acordo com as hipóteses descritas, aparentemente começa no momento em que a camada sedimentar atinge uma porosidade em torno de 35%, quando a cimentação entre os grãos confere uma rigidez na estrutura, que inicialmente não estava presente (HAMILTON, 1959).

2.3.4.1 Compactação mecânica

O processo de compactação mecânica ocorre por meio da acomodação dos sedimentos, que se dá pela rotação, deslizamento, flexão e fraturamento dos grãos. Uma carga aplicada sobre uma camada sedimentar saturada é primeiramente sustentada pelo fluido contido em seus poros como excesso de poro-pressão e gradualmente transferida para a estrutura conforme este fluido é expulso através da sua rede de poros interconectados, resultando na redução de volume do material. Este processo termina quando o excesso de poro-pressão é aliviado da estrutura sedimentar e a pressão no fluido corresponde ao seu equilíbrio estático.

As mudanças de pressão que ocorrem em uma camada sedimentar saturada podem ser explicadas por meio da simples analogia de um cilindro cheio de água, equipado com uma mola e um pistão através do qual um registro permite que a água escape, conforme está apresentado na Figura 10: 1) em um primeiro momento, nenhuma carga está aplicada ao cilindro e o perfil de pressão no fluido é hidrostático; 2) quando uma carga é aplicada ao êmbolo e o registro está fechado, praticamente toda a carga é suportada pela água, pois a água é muito menos compressível do que a mola; 3) no momento em que o registro é aberto, a carga é gradualmente transferida da água para a mola ao longo do que o volume de água flui através do registro; 4) finalmente, a carga é inteiramente suportada pela mola, e o perfil de pressão retorna ao estado hidrostático. A evolução das poro-pressões em uma camada sedimentar saturada ocorre de maneira similar. A consolidação de uma camada de sedimentos depositada sobre uma base impermeável começa na sua parte superior e progride para baixo (TAYLOR, 1948).

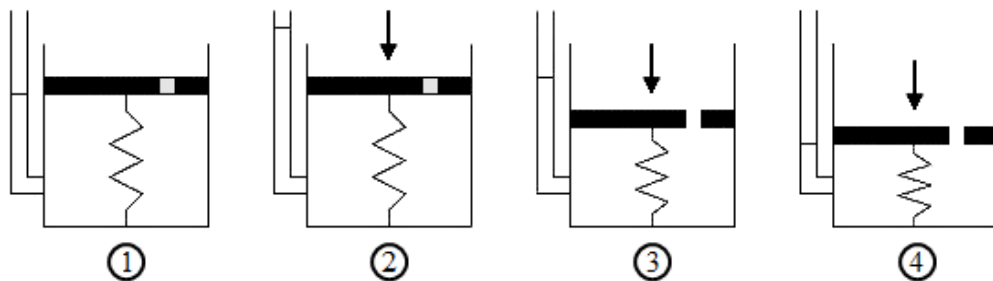


Figura 10: analogia mecânica ao adensamento do solo (WIKIWAND, 2016)

2.3.4.2 Compactação químico-mecânica

O fenômeno de pressão-solução responsável pelo processo químico-mecânico de compactação é conhecido internacionalmente pela sigla *IPS* – *Intergranular Pressure-Solution*. Trata-se de um mecanismo de deformação e variação de porosidade resultante de um gradiente de potencial químico provocado por elevadas tensões de contato entre os grãos. Este processo ocorre principalmente em rochas sedimentares e é tradicionalmente descrito em três etapas: 1) dissolução de minerais na superfície de contato dos grãos; 2) difusão do soluto ao longo do contato; 3) precipitação dos minerais nas paredes livres dos grãos. A mais lenta das três etapas controla a velocidade do processo de deformação (RUTTER, 1983; ANGEVINE; TURCOTTE, 1983, LEHNER, 1995; MEER; SPIERS, 1997; Meer et al. 2000; Gundersen et al. 2002). A Figura 11 apresenta um esquema das três etapas do processo.

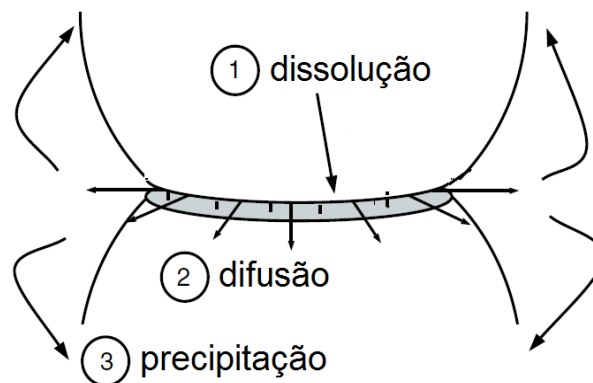


Figura 11: etapas do processo de pressão-solução (Gundersen et al. 2002)

Alguns pesquisadores divergem a respeito de qual das três etapas controla a velocidade do fenômeno. Para Anzalone et al. (2006) esta etapa é a dissolução dos minerais. Segundo Weyl (1959), Rutter (1976) e Gundersen et al. (2002), a etapa mais lenta é a difusão. Para outros, a etapa que costuma controlar a velocidade do processo é a reação de precipitação (MEER; SPIERS, 1999a). Muitos autores consideram que a etapa que controla a taxa de deformação não é necessariamente uma só, e pode inclusive mudar durante o processo de compactação de uma determinada camada de sedimentos, já que este depende de muitos fatores que podem variar ao longo do tempo, como a tensão na superfície de contato entre os grãos, temperatura, pressão e composição química do fluido existente nos poros do material, granulometria, mineralogia e nível de cimentação dos grãos (Boer et al. 1977; TADA; SIEVER, 1989; Hellmann et al. 2002; Niemeijer et al. 2002; ZHANG; SPIERS, 2005).

Dois modelos de estruturas de contato entre os grãos foram propostos para o mecanismo de pressão-solução em meios saturados: *'thin water film'* e *'island & channel'* (Schneider et al. 1996; MEER; SPIERS, 1997; Hellmann et al. 2002). Ambos os modelos assumem a existência de um fluido preso na superfície de contato entre os grãos que não pode ser expelido para fora pela tensão aplicada, assim como ambos são baseados no processo de transferência de material definido pelas três etapas sequenciais de dissolução, difusão e precipitação. A diferença entre eles é principalmente a natureza física das regiões intergranulares. Enquanto o modelo *'thin water film'* considera uma fina película contínua de fluido viscoso no contato entre os grãos (LEHNER, 1995; SHIMIZU, 1995), o modelo *'island & channel'* considera uma região de contato intergranular que consiste em contatos sólido-sólido por meio de ilhas que suportam as tensões impostas, cercadas por uma rede de canais interconectados onde fica o fluido (TADA; SIEVER, 1989; HICKMAN; EVANS, 1991; Schneider et al. 1994). Em ambos os modelos a abordagem matemática é equivalente. Sendo assim, a distinção entre os modelos não se faz necessária para os fins deste trabalho.

2.3.5 Temperatura

O estudo da evolução térmica e dos processos que a controlam tem importância fundamental para a compreensão do histórico geodinâmico de bacias sedimentares em virtude dos efeitos da temperatura sobre diversos fatores como a viscosidade dos fluidos e propriedades físico-químicas dos minerais, tendo impacto direto sobre os processos de compactação mecânica e químico-mecânica dos sedimentos. É também de grande importância em várias áreas aplicadas, como energia geotérmica, formação e evolução de hidrocarbonetos e alguns depósitos minerais (Vasseur et al. 1995; Palumbo et al. 1999; FERRERO; GALLAGHER, 2002).

A temperatura das bacias sedimentares aumenta com a profundidade. Portanto, o fluxo de calor é ascendente, transportado do interior para o exterior da Terra, onde a principal fonte de calor são processos radiogênicos. Na astenosfera este calor é transportado principalmente por convecção, enquanto que na litosfera ele é transportado principalmente por condução. Embora o fluxo de água também possa transportar calor nas bacias, geralmente o movimento dos fluidos costuma ser muito lento, e pode-se considerar que em muitos casos o transporte de calor é controlado por condução (BETHKE, 1985; JESSOP; MAJOROWICZ, 1994; BJORLYKKE, 2010; Cloetingh et al. 2010).

A condutividade térmica é um parâmetro chave, pois controla o fluxo de calor e a distribuição de temperatura nas bacias. Para rochas sedimentares, a condutividade térmica depende principalmente de quatro fatores: 1) sua estrutura; 2) composição mineralógica; 3) composição dos fluidos; 4) temperatura. A condutividade térmica de minerais sedimentares comuns varia em torno de 7.7 W/m/°C para o quartzo a 1.8 W/m/°C para illita e smectita, e a condutividade da água tem valor em torno de 0.6 W/m/°C. Com o aumento da temperatura, a condutividade dos minerais decresce, enquanto que a da água aumenta até $\pm 150^{\circ}\text{C}$ e decresce para temperaturas superiores. Portanto, a condutividade térmica de uma camada de sedimentos aumenta conforme sua porosidade diminui, e diminui conforme a sua temperatura aumenta (CULL; CONLEY, 1983; Vasseur et al. 1995; Midttomme et al. 1997; CARDOSO; HAMZA, 2014).

Sais como halita e anidrita apresentam condutividade térmica em torno de 5.5 W/m/°C, enquanto alguns folhelhos podem ter valores em torno de 1.0 a 2.5 W/m/°C. Arenitos e calcários têm valores entre folhelhos e sal. A condutividade dos folhelhos do Mar do Norte varia entre 0.8 a 1.1 W/m/°C, valores não muito maiores do que a água. Atualmente, valores típicos de gradientes geotérmicos estão entre 25 a 45°C/km, podendo-se atingir temperaturas superiores a 200°C para camadas mais profundas de algumas bacias. O fluxo térmico em bacias sedimentares oceânicas costuma ter valores entre 30 a 70 mW/m². Rochas com baixa condutividade, como argilitos e folhelhos, geralmente apresentam gradientes geotérmicos elevados, e rochas altamente condutoras, como sal, gradientes geotérmicos menores (CONDIE; 1997; Cloetingh et al. 2003; Amir et al. 2005, BJORLYKKE, 2010).

A partir de um estudo baseado em informações coletadas em dezenas de poços distribuídos ao longo da Bacia de Campos, Cardoso e Hamza (2014) concluíram que atualmente as condutividades térmicas das diferentes camadas que compõe esta bacia variam entre 1 e 4 W/m/°C, com fluxos térmicos entre 30 e 100 mW/m² e gradientes geotérmicos entre 24 e 41°C/km. Alguns poços indicaram temperaturas superiores a 160°C em profundidades superiores a 4600 metros e temperaturas do assoalho oceânico inferiores a 10°C.

Em seus trabalhos, Jarosinski et al. (2011) e Buitter et al. (2009) aplicaram condições de contorno de temperatura prescrita no topo, 0°C e 10°C, respectivamente, e na base de seus modelos computacionais, 1300°C e 1336°C, respectivamente. Ambos modelaram a crosta superior e inferior, o manto da litosfera e a astenosfera em modelos com mais de 200 km de profundidade, com objetivo de representar o comportamento termo-mecânico da litosfera associado à

tectônica de placas. Em modelos menos profundos, em que o objetivo do estudo se concentre no ambiente de formação de bacias sedimentares, uma alternativa para a condição de contorno inferior é a aplicação de um fluxo térmico ascendente na base do modelo, que represente o calor transportado do interior do planeta para estas camadas mais externas.

A Figura 12 apresenta um mapa do fluxo térmico da Terra. Comparando estes dados com os limites de placas apresentados na Figura 7, observa-se que as zonas de maior fluxo térmico encontram-se exatamente sobre limites divergentes, como por exemplo, entre: 1) a placa do Pacífico com as placas Antártica e Nazca; 2) a placa Norte Americana com a placa Euro-Asiática; 3) a placa Sul-Americana com a placa Africana; 4) a placa Africana com a placa Antártica; 5) a placa Africana com as placas Indiana e Australiana. Estes movimentos divergentes levam ao estiramento e conseqüente afinamento da litosfera e ascensão do topo do manto, elevando as temperaturas e o fluxo térmico destas regiões do planeta, como mostra o esquema da Figura 5.

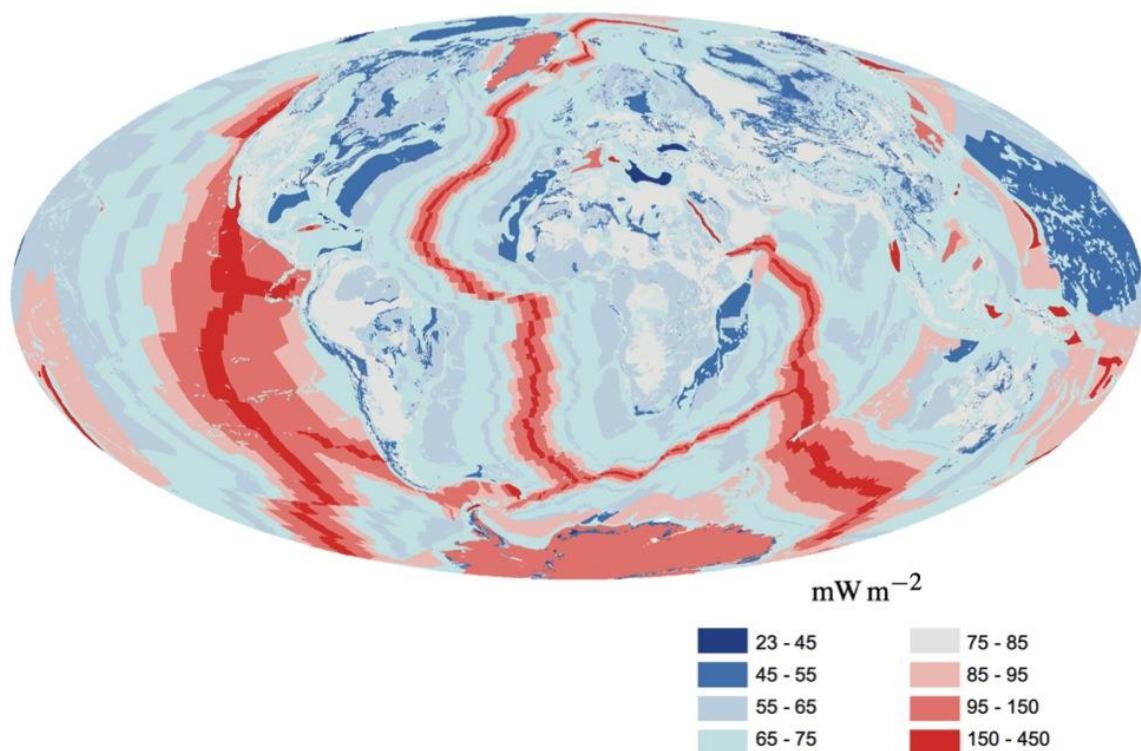


Figura 12: mapa de fluxo térmico da Terra (WIKIPEDIA, 2016a)

3 MODELO POROMECÂNICO EM DEFORMAÇÕES FINITAS

Os elementos apresentados no capítulo 2 evidenciam a importância de utilizar modelos teóricos e computacionais capazes de lidar com a complexidade dos diversos fenômenos envolvidos nos processos de formação e deformação de bacias sedimentares que ocorrem em escala de tempo geológico. Este capítulo apresenta o modelo constitutivo desenvolvido neste trabalho baseado nos conceitos da poromecânica, onde as deformações puramente mecânicas são representadas por meio de um modelo plástico e as deformações de natureza químico-mecânica por meio de um modelo viscoplástico. O modelo poro-elasto-visco-plástico é apresentado inicialmente no contexto isotérmico. A extensão do modelo para incluir o efeito da temperatura sobre o comportamento do material é apresentada na seção 3.3.

Define-se a poromecânica como o estudo do comportamento de materiais porosos, os quais são significativamente influenciados pelo fluido contido em seus vazios. Na escala microscópica (escala dos poros), um meio poroso aparece como um material heterogêneo definido por uma fase sólida e os diferentes fluidos saturando o seu espaço poroso interconectado. Na escala macroscópica (escala do volume elementar representativo), uma partícula do meio poroso é a superposição geométrica de uma partícula do esqueleto (onde podem existir poros oclusos) e de uma ou mais partículas de fluido. O esqueleto é a percepção macroscópica da fase sólida. Esta representação é esquematizada na Figura 13 (COUSSY, 2004).

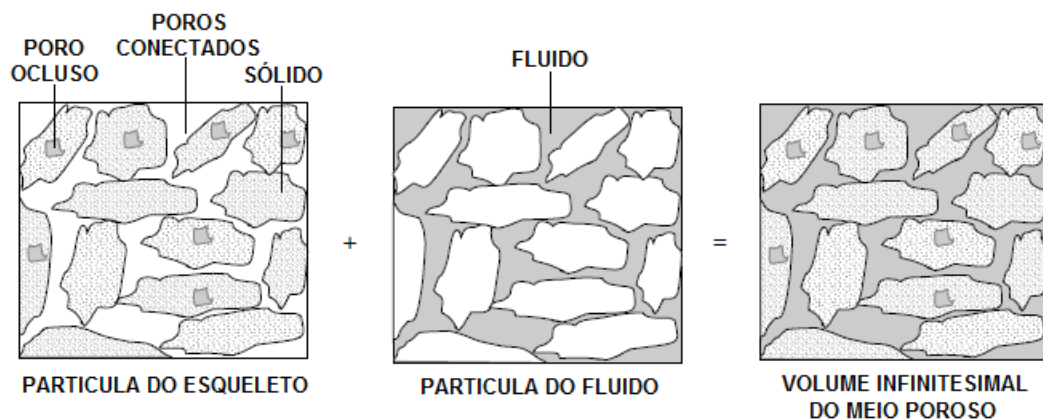


Figura 13: descrição geométrica do meio poroso (COUSSY, 2004)

3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA POROMECÂNICO

Neste trabalho utiliza-se a abordagem macroscópica para descrição de um meio poroso saturado por um único fluido. Desta forma, a posição espacial macroscópica do volume elementar representativo (*VER*) do material caracteriza tanto a posição do esqueleto quanto a do fluido. Não é considerada a existência de poros oclusos no esqueleto. Sendo assim, a palavra porosidade diz respeito somente aos poros interconectados do meio poroso, representando a parcela de fluido contida em um volume infinitesimal poroso $d\Omega_t$. A porosidade Lagrangeana ϕ é definida pela razão entre o volume de fluido na configuração atual $d\Omega_t^f$ (representado pelo sobrescrito *f*) sobre o seu volume inicial total $d\Omega_0$, enquanto a porosidade Euleriana φ quantifica o conteúdo de fluido em relação ao volume total atual $d\Omega_t$. As expressões (1) apresentam, respectivamente, as definições de porosidade Lagrangeana e Euleriana.

$$\phi = \frac{d\Omega_t^f}{d\Omega_0} \qquad \varphi = \frac{d\Omega_t^f}{d\Omega_t} \qquad (1)$$

Portanto, a massa específica do meio poroso ρ é definida através da massa específica do esqueleto ρ^s , da massa específica do fluido ρ^f e da porosidade Euleriana. A Figura 14 apresenta a equação (2) em função de φ para $\rho^s = 2300 \text{ kg/m}^3$ e $\rho^f = 1000 \text{ kg/m}^3$.

$$\rho = \rho^s (1 - \varphi) + \rho^f \varphi \qquad (2)$$

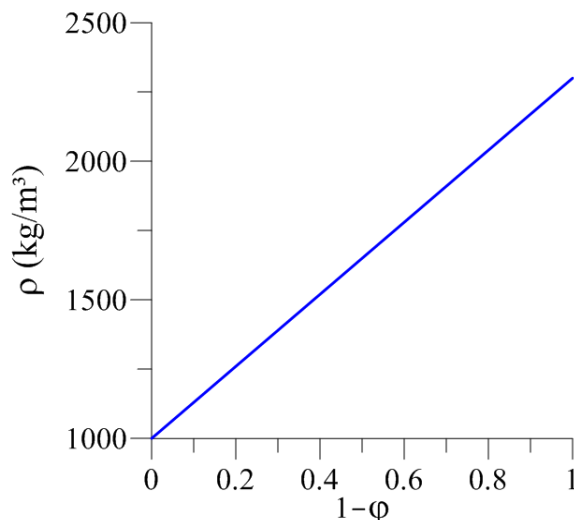


Figura 14: massa específica do meio poroso em função da porosidade

Na escala macroscópica adotada para a descrição das deformações, a transformação do meio poroso é classicamente caracterizada através da cinemática das partículas do esqueleto. A cinemática das partículas do fluido é levada em conta apenas através do seu movimento relativo em relação ao esqueleto sólido. A Figura 15 apresenta a descrição cinemática do meio poroso, onde $\underline{\xi} = \underline{\xi}^s$ é o vetor deslocamento definido pela diferença entre a posição \underline{x} de uma partícula do esqueleto em $t = t$ e sua posição inicial \underline{X} em $t = 0$, $\underline{\xi} = \underline{x} - \underline{X}$. Os vetores $\underline{\xi}^f$ e $\underline{\xi}^r$ representam o deslocamento da partícula de fluido e o deslocamento relativo entre a partícula de fluido e a partícula de sólido do meio poroso, respectivamente.

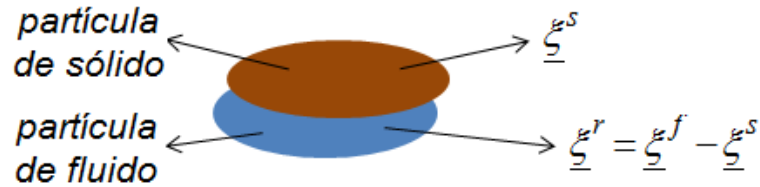


Figura 15: descrição cinemática do meio poroso

Seja $\underline{\underline{F}}$ o tensor gradiente de transformação definido na equação (3), onde $\underline{\underline{1}}$ é o tensor unitário de segunda ordem. O tensor $\underline{\underline{F}}$ transporta um vetor material $d\underline{X}$ em um vetor material $d\underline{x}$ através da relação $d\underline{x} = \underline{\underline{F}} \cdot d\underline{X}$.

$$\underline{\underline{F}} = \frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} = \underline{\underline{1}} + \frac{\partial \underline{\xi}}{\partial \underline{X}} \quad (3)$$

A partir do gradiente de transformação, define-se o Jacobiano da transformação, que transforma um volume material inicial $d\Omega_0$ no volume material na configuração atual $d\Omega_t$.

$$J = \det \underline{\underline{F}} = \frac{d\Omega_t}{d\Omega_0} \quad (4)$$

A porosidade Lagrangeana está relacionada à porosidade Euleriana através do Jacobiano da transformação segundo a relação (5):

$$\phi = J\phi \quad (5)$$

Para a definição do problema poromecânico em evolução quase-estática, duas equações referentes ao balanço de momento e de massa devem ser determinadas. Desconsiderando os efeitos inerciais, tem-se a equação de equilíbrio para o meio contínuo poroso, onde $\underline{\underline{\sigma}}$ é o tensor de tensões de Cauchy e \underline{g} o vetor aceleração da gravidade.

$$\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{g} = 0 \quad (6)$$

A segunda equação refere-se ao balanço de massa de fluido que passa através do meio poroso definida como

$$\frac{d}{dt}(\rho^f \phi) + J \operatorname{div}(\rho^f \underline{q}^f) = 0 \quad (7)$$

onde $\underline{q}^f = \phi \underline{V}^r$ é o vetor filtração definido pela porosidade Euleriana ϕ e pela velocidade relativa \underline{V}^r da partícula de fluido em relação ao esqueleto sólido.

A lei de Darcy define o vetor filtração, onde $\underline{\underline{K}}^f$ é o tensor permeabilidade e p a poropressão:

$$\underline{q}^f = \underline{\underline{K}}^f \cdot (-\nabla p + \rho^f \underline{g}) \quad (8)$$

Para resolver o problema poromecânico, a geometria assim como os valores iniciais de todas as variáveis envolvidas devem ser estabelecidos. Além das condições iniciais, as condições de contorno mecânicas e hidráulicas também devem ser definidas no contorno $\partial\Omega_t$ do domínio geométrico $d\Omega_t$. Sejam S^{Ti} e $S^{\xi i}$ as partes de $\partial\Omega_t$ onde as i -ésimas componentes dos vetores de tensão e deslocamento são impostas, tal que $S^{Ti} \cup S^{\xi i} = \partial\Omega_t$ e $S^{Ti} \cap S^{\xi i} = \emptyset$, tem-se

$$\left(\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}\right) \cdot \underline{e}_i = T_i = T_i^d \text{ em } S^{Ti} \quad \underline{\xi} \cdot \underline{e}_i = \xi_i^d \text{ em } S^{\xi i} \quad (9)$$

onde \underline{n} é o vetor unitário normal à superfície, \underline{e}_i ($i=1,2,3$) são os vetores unitários ortogonais que definem o sistema de coordenadas e \underline{T} é o vetor tensão. As informações prescritas são indicadas pelo sobrescrito d à direita das variáveis correspondentes.

Sejam S^{q^f} e S^p as partes de $\partial\Omega_t$ onde a componente normal do fluxo de massa fluida e a pressão são impostas, tal que $S^{q^f} \cup S^p = \partial\Omega_t$ e $S^{q^f} \cap S^p = \emptyset$, tem-se:

$$\underline{q}^f \cdot \underline{n} = q^{f,d} \text{ em } S^{q^f} \qquad p = p^d \text{ em } S^p \qquad (10)$$

3.2 MODELO CONSTITUTIVO POROMECÂNICO

Considere um volume elementar representativo do meio poroso $d\Omega_t$ sujeito a um estado de tensões $\underline{\underline{\sigma}}$ e pressão p . Assume-se que na escala macroscópica a decomposição multiplicativa da transformação geométrica do volume elementar em uma parte elástica e uma parte irreversível, originalmente introduzida para materiais monofásicos por Lee (1969) e Mandel (1971), é válida para meios porosos (DORMIEUX; MAGHOUS, 1999). Removendo o carregamento aplicado ao volume inicial $d\Omega_0$, o volume $d\Omega_t$ passa para configuração relaxada $d\Omega_u$. A transformação entre $d\Omega_t$ e $d\Omega_u$ é referida como a parte elástica da transformação. A Figura 16 ilustra a situação descrita sobre o volume elementar poroso:

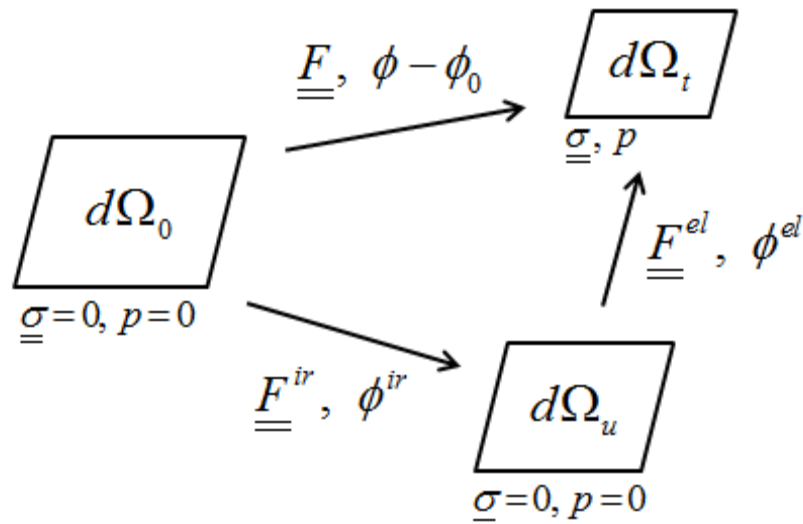


Figura 16: decomposição do gradiente de transformação e variação de porosidade

Seja $\underline{\underline{F}}^{el}$ o gradiente de transformação geométrica elástica entre $d\Omega_u$ e $d\Omega_t$, e $\underline{\underline{F}}^{ir}$ o gradiente de transformação geométrica irreversível entre $d\Omega_0$ e $d\Omega_u$, o gradiente de transformação geométrica $\underline{\underline{F}}$ do esqueleto pode ser decomposto como (DORMIEUX; MAGHOUS, 1999):

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^{el} \cdot \underline{\underline{F}}^{ir} \quad (11)$$

Define-se a parte irreversível do Jacobiano da transformação:

$$J^{ir} = \frac{d\Omega_u}{d\Omega_0} = \det \underline{\underline{F}}^{ir} \quad (12)$$

A variação da porosidade elástica ϕ^{el} e a parte irreversível da variação de porosidade ϕ^{ir} são definidas como:

$$\phi^{el} = \frac{d\Omega_t^f - d\Omega_u^f}{d\Omega_u} \quad \phi^{ir} = \frac{d\Omega_u^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} \quad (13)$$

Desta forma, pode-se escrever a variação da porosidade Lagrangeana:

$$\phi - \phi_0 = \phi^{ir} + J^{ir} \phi^{el} \quad (14)$$

A transformação elástica sofrida pelo *VER* é considerada infinitesimal. As equações constitutivas da poroelasticidade linear são dadas de acordo com a teoria de Biot, onde $\underline{\underline{C}}$ é o tensor dos módulos elásticos drenados do esqueleto, $\underline{\underline{\epsilon}}^{el}$ é o tensor de deformação elástica infinitesimal associado à seqüência elástica $\underline{\underline{F}}^{el}$ da partícula do esqueleto, $\underline{\underline{B}}$ é o tensor de Biot e M é o módulo de Biot.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{el} - \underline{\underline{B}} p \quad (15)$$

$$\phi^{el} = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{el} + \frac{p}{M} \quad (16)$$

Os termos $\underline{\underline{C}}$, $\underline{\underline{B}}$ e M caracterizam as propriedades poroelásticas do material poroso na sua configuração relaxada $d\Omega_u$. Portanto, eles dependem a priori das modificações da geometria (microestrutura) que aconteceram durante a sequência irreversível $\underline{\underline{F}}^{ir}$.

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}(\underline{\underline{F}}^{ir}) \quad \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{B}}(\underline{\underline{F}}^{ir}) \quad M = M(\underline{\underline{F}}^{ir}) \quad (17)$$

Para um material isotrópico, o tensor de quarta ordem $\underline{\underline{C}}$ e o tensor de segunda ordem de Biot $\underline{\underline{B}}$ tomam as formas apresentadas em (18) e (19), onde K e μ são, respectivamente, o módulo de compressão e de cisalhamento drenados do esqueleto, $\underline{\underline{1}}$ é o tensor unitário de quarta ordem e b é o coeficiente de Biot. Nesta hipótese, é razoável admitir que as propriedades poroelásticas do material dependam apenas de $J^{ir} = \det \underline{\underline{F}}^{ir}$.

$$\underline{\underline{C}} = (K - 2\mu/3)\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} + 2\mu\underline{\underline{1}} \quad (18)$$

$$\underline{\underline{B}} = b\underline{\underline{1}} \quad (19)$$

As equações de estado macroscópicas que descrevem o comportamento do material em forma de taxa foram formuladas em Bernaud et al. (2002) no contexto da poroplasticidade finita, com base em trabalhos teóricos anteriores (Bourgeois et al. 1995; BOURGEOIS; DORMIEUX, 1997; DORMIEUX; MAGHOUS, 1999; DORMIEUX; MAGHOUS, 2000; MAGHOUS, 2009). Estas equações foram obtidas a partir da derivada das equações constitutivas poroelásticas (15) e (16) em relação ao tempo, levando em conta a evolução das propriedades poromecânicas do material devido à modificação de caráter irreversível da sua microestrutura. Estendendo esta formulação para incorporar as deformações de natureza químico-mecânica associadas ao processo de pressão-solução (IPS), chega-se às seguintes expressões, onde $\underline{\underline{\sigma}}^{te} = \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{B}}p$ é a tensão efetiva de Biot, $\underline{\underline{\Omega}}$ é o tensor taxa de rotação que leva em conta a rotação não infinitesimal do volume elementar poroso, $\underline{\underline{d}}$ é o tensor taxa de deformação e $\underline{\underline{d}}^{ir}$ é o tensor taxa de deformação irreversível.

$$\frac{D_J \underline{\underline{\sigma}}^{ie}}{Dt} = \dot{\underline{\underline{\sigma}}}^{ie} + \underline{\underline{\sigma}}^{ie} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ie} = \dot{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ie} + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) \quad (20)$$

$$\dot{p} = M \left(\frac{\dot{\underline{\underline{\phi}}} - \dot{\underline{\underline{\phi}}}^{ir}}{J^{ir}} - \dot{b} \text{tr}(\underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ie}) - b \text{tr}(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) \right) + \frac{\dot{M}}{M} p \quad (21)$$

A equação (20) envolve a derivada de Jaumann da tensão efetiva de Biot $\frac{D_J \underline{\underline{\sigma}}^{ie}}{Dt}$, e um termo da derivada material do tensor dos módulos elásticos drenados do esqueleto $\dot{\underline{\underline{C}}}$. Este termo adicional expressa o efeito das grandes deformações irreversíveis sobre as propriedades elásticas do material. A equação (21) relaciona a taxa de variação de porosidade à taxa de variação de pressão e à taxa de deformação. O efeito das grandes deformações irreversíveis sobre as propriedades poroelásticas do material aparece nos termos envolvendo as taxas de variação do módulo e coeficiente de Biot, \dot{M} e \dot{b} , respectivamente.

O tensor taxa de deformação $\underline{\underline{d}}$ é definido pela parte simétrica $\{ \}_s$ do gradiente de velocidade Euleriana das partículas do esqueleto sólido, e o tensor taxa de rotação $\underline{\underline{\Omega}}$ é definido pela parte anti-simétrica $\{ \}_a$ do gradiente de velocidade:

$$\underline{\underline{d}} = \{ \underline{\underline{\nabla V}} \}_s = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\nabla V}} + {}^T \underline{\underline{\nabla V}}) \quad (22)$$

$$\underline{\underline{\Omega}} = \{ \underline{\underline{\nabla V}} \}_a = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\nabla V}} - {}^T \underline{\underline{\nabla V}}) \quad (23)$$

De forma equivalente, pode-se reescrever os tensores $\underline{\underline{d}}$ e $\underline{\underline{\Omega}}$ como:

$$\underline{\underline{d}} = \{ \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \}_s, \quad \underline{\underline{\Omega}} = \{ \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \}_a \quad (24)$$

E também o tensor taxa de deformação irreversível $\underline{\underline{d}}^{ir}$ como:

$$\underline{\underline{d}}^{ir} = \{ \dot{\underline{\underline{F}}}^{ir} \cdot \underline{\underline{F}}^{ir-1} \}_s \quad (25)$$

Com base nos dois mecanismos de deformação irreversível considerados na formulação do presente modelo constitutivo, o tensor $\underline{\underline{d}}^{ir}$ é definido como (MAGHOUS, 2009)

$$\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp} \quad (26)$$

onde $\underline{\underline{d}}^p$ é a parte plástica da taxa de deformação irreversível, que representa as deformações puramente mecânicas sofridas pelo material poroso, e $\underline{\underline{d}}^{vp}$ a componente viscoplástica da taxa de deformação irreversível, que representa as deformações de natureza químico-mecânica.

A partir da derivada material de um volume elementar, definida como $d\dot{\Omega}_t = \text{div}(\underline{\underline{V}})d\Omega_t$, tem-se a derivada material do Jacobiano da transformação:

$$\dot{J} = \frac{d}{dt} \left(\frac{d\Omega_t}{d\Omega_0} \right) = \text{div} \underline{\underline{V}} \frac{d\Omega_t}{d\Omega_0} \quad (27)$$

Como $\text{div} \underline{\underline{V}} = \text{tr} \left\{ \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{V}}) \right\}_s$, de acordo com (22) pode-se reescrever a derivada material do Jacobiano da transformação em função do traço do tensor taxa de deformação:

$$\dot{J} = J \text{tr} \underline{\underline{d}} \quad (28)$$

De forma análoga:

$$\dot{J}^{ir} = J^{ir} \text{tr} \underline{\underline{d}}^{ir} \quad (29)$$

A parte irreversível do Jacobiano da transformação J^{ir} pode ser dividida em uma parte plástica J^p , e viscoplástica J^{vp} , definidas como:

$$\dot{J}^p = J^p \text{tr} \underline{\underline{d}}^p \quad (30)$$

$$\dot{J}^{vp} = J^{vp} \text{tr} \underline{\underline{d}}^{vp} \quad (31)$$

A decomposição aditiva de $\underline{\underline{d}}^{ir}$ apresentada em (26) juntamente com as definições (30) e (31) implicam na decomposição multiplicativa de J^{ir} em relação à J^p e J^{vp} :

$$J^{ir} = J^p J^{vp} \quad (32)$$

A fase sólida que constitui o esqueleto é considerada incompressível durante a transformação irreversível do volume elementar poroso, ou seja, durante a sequência irreversível $\underline{\underline{F}}^{ir}$ seu volume de sólidos permanece inalterado. Isto leva ao seguinte raciocínio a respeito do balanço de massa sólida no material:

$$d\Omega_u^s = d\Omega_0^s \quad (33)$$

De forma equivalente:

$$d\Omega_u - d\Omega_u^f = d\Omega_0 - d\Omega_0^f \quad (34)$$

Dividindo por $d\Omega_0$:

$$\frac{d\Omega_u}{d\Omega_0} = \frac{d\Omega_0}{d\Omega_0} + \frac{d\Omega_u^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} \quad (35)$$

Portanto, chega-se a seguinte relação entre J^{ir} e ϕ^{ir} , o que significa que durante a transformação irreversível $\underline{\underline{F}}^{ir}$ toda a variação volumétrica do material se dá unicamente devido à sua variação de porosidade.

$$J^{ir} = 1 + \phi^{ir} \quad (36)$$

Derivando a expressão (36) em relação ao tempo, tem-se que a taxa de variação da parte irreversível do Jacobiano da transformação e da porosidade irreversível são equivalentes:

$$\dot{J}^{ir} = \dot{\phi}^{ir} \quad (37)$$

Portanto, de acordo com (29):

$$\dot{\phi}^{ir} = J^{ir} \operatorname{tr} \underline{\underline{d}}^{ir} \quad (38)$$

Substituindo (26) e (32) em (38), tem-se:

$$\dot{\phi}^{ir} = J^p J^{vp} \operatorname{tr} (\underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp}) = J^{vp} (J^p \operatorname{tr} \underline{\underline{d}}^p) + J^p (J^{vp} \operatorname{tr} \underline{\underline{d}}^{vp}) \quad (39)$$

Reescreve-se então a equação (39):

$$\dot{\phi}^{ir} = J^{vp} \dot{\phi}^p + J^p \dot{\phi}^{vp} \quad (40)$$

Onde:

$$\dot{\phi}^p = J^p \operatorname{tr} \underline{\underline{d}}^p \quad (41)$$

$$\dot{\phi}^{vp} = J^{vp} \operatorname{tr} \underline{\underline{d}}^{vp} \quad (42)$$

Lembrando que a parcela elástica da transformação é considerada infinitesimal, tem-se que $\underline{\underline{F}}^{el} \approx \underline{\underline{1}}$ e $|\varphi^{el}| \ll 1$. Portanto, o gradiente de transformação geométrica, o Jacobiano da transformação, e o balanço de porosidade Lagrangeana podem ser aproximados como:

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^{el} \cdot \underline{\underline{F}}^{ir} \approx \underline{\underline{F}}^{ir} \quad (43)$$

$$J = \det \underline{\underline{F}}^{el} \det \underline{\underline{F}}^{ir} \approx J^{ir} \quad (44)$$

$$\phi - \phi_0 = \phi^{ir} + J^{ir} \phi^{el} \approx \phi^{ir} \quad (45)$$

Substituindo (36) em (45):

$$J^{ir} = 1 + \phi - \phi_0 \quad (46)$$

Substituindo (44) na relação (5), e aplicando na equação (46), chega-se na expressão (47) que relaciona a porosidade Euleriana à porosidade Lagrangeana inicial e à parte irreversível do Jacobiano da transformação:

$$\phi = 1 - \frac{1 - \phi_0}{J^{ir}} \quad (47)$$

A Figura 17 ilustra a expressão (47) para o caso de uma porosidade inicial $\phi_0 = 0.72$. Observa-se que a condição $J^{ir} = 1 - \phi_0$ corresponde ao total fechamento dos poros.

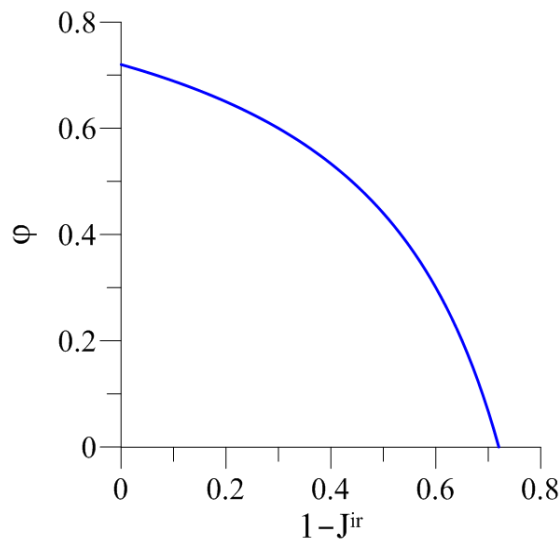


Figura 17: lei de evolução da porosidade

3.2.1 Modelo plástico

Generalizando o conceito de potencial plástico, introduz-se a função $g^p(\underline{\underline{\sigma}}, p)$, cujas derivadas levam às taxas de deformação e porosidade plásticas, onde $\dot{\chi}$ é um multiplicador plástico não-negativo (Bourgeois et al. 1995; DORMIEUX; MAGHOUS, 2000):

$$\underline{\underline{d}}^p = \dot{\chi} \frac{\partial g^p}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad \dot{\phi}^p = J^p \dot{\chi} \frac{\partial g^p}{\partial p} \quad (48)$$

Combinando (41) e (48), observa-se que o potencial plástico depende de $\underline{\underline{\sigma}}$ e p através da tensão efetiva de Terzaghi, $\underline{\underline{\sigma}}' = \underline{\underline{\sigma}} + p\underline{\underline{1}}$ (Bourgeois et al. 1995; Bernaud et al. 2006):

$$g^p(\underline{\underline{\sigma}}, p) = G(\underline{\underline{\sigma}}') \quad \underline{\underline{d}}^p = \dot{\chi} \frac{\partial G}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \quad (49)$$

O comportamento plástico do material é baseado no modelo Cam-Clay modificado (WOOD, 1990). A regra de fluxo plástico é associada (HILL, 1950) e o critério de plasticidade f^p está apresentado na expressão (50)

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}', p_c) = q^2 + M_{cs}^2 p'(p' + p_c) \quad (50)$$

onde q é a tensão desviadora, p' é a tensão efetiva média, M_{cs} é a inclinação da linha de estado crítico sob a qual o solo apresenta deformação plástica sem que ocorra variação volumétrica ou acréscimo de tensão efetiva (seu valor deve ser obtido a partir de dados experimentais), e p_c é a pressão de consolidação do solo que define o parâmetro de endurecimento do modelo. Assume-se que a forma da superfície de plastificação não é afetada pelas grandes deformações plásticas. Sua forma elíptica está ilustrada na Figura 18.

$$p' = \frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}}' \quad q = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}}} \quad (51)$$

O tensor desviador $\underline{\underline{s}}$ é definido como:

$$\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}} - \frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{1}} \quad (52)$$

Reescrevendo a equação do critério de plasticidade em função do tensor desviador, tem-se:

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}', p_c) = \frac{3}{2} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}} + M_{cs}^2 p'(p' + p_c) \quad (53)$$

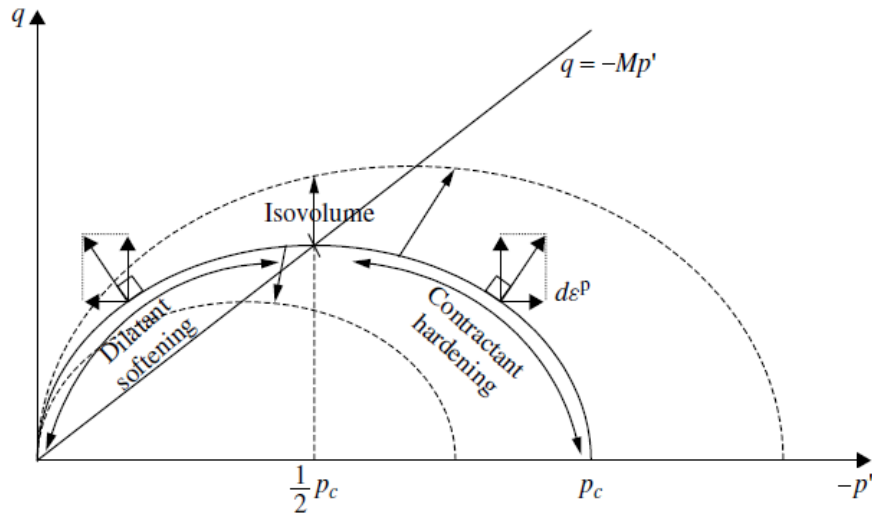


Figura 18: modelo Cam-Clay modificado (COUSSY, 2004)

Para materiais elasto-plásticos em deformações infinitesimais, a lei de endurecimento do modelo Cam-Clay é classicamente descrita como função exponencial das deformações volumétricas plásticas $\epsilon^p = \text{tr} \underline{\underline{\epsilon}}^p$, onde $\underline{\underline{\epsilon}}^p$ é o tensor de deformação plástica infinitesimal e α uma constante que pode ser calibrada em ensaios de compressão isótropa (BORJA; LEE, 1990):

$$p_c(\epsilon^p) = p_{c0} e^{-\alpha \epsilon^p} \quad (54)$$

Um importante pressuposto desta lei de endurecimento é que ela se mantenha válida mesmo sob carregamentos não isotrópicos. Isso implica considerar que o efeito das deformações plásticas desviadoras sob o endurecimento do material é insignificante, ou seja, que o endurecimento do material é controlado pela sua densificação plástica (Guéguen et al. 2003).

Uma forma de generalizar a equação (54) para o domínio de grandes deformações plásticas consiste em substituir ϵ^p por $J^p - 1$, já que no domínio das pequenas deformações ambas as quantidades são equivalentes (Bernaud et al. 2006).

$$p_c(\epsilon^p) = p_{c0} e^{-\alpha(J^p - 1)} \quad (55)$$

No entanto, a lei de endurecimento como descrita em (55) não impõe a condição correspondente ao total fechamento dos poros $J^p > 1 - \phi_0$, o que permite o desenvolvimento de valores negativos de porosidade. Este fenômeno pode acontecer se o material for submetido a altas tensões confinantes, como demonstrado em Deudé et al. (2004) e Bernaud et al. (2006).

A partir de uma formulação micromecânica no contexto das grandes deformações plásticas para determinar a carga limite de uma esfera oca submetida a uma compressão isotrópa, Barthélémy et al. (2003) chegaram à seguinte lei de endurecimento logarítmica:

$$p_c(\varphi) = p_{c0} \frac{\ln \varphi}{\ln \phi_0} \quad (56)$$

Esta lei foi utilizada nos trabalhos de Bernaud et al. (2006) e Maghous et al. (2014) no âmbito da poroplasticidade finita aplicada a modelagem de bacias sedimentares, onde a natureza das deformações irreversíveis era puramente mecânica e a lei de evolução da porosidade Euleriana função apenas das deformações plásticas $\varphi = 1 - \frac{1 - \phi_0}{J^p}$, resultando na lei de encruamento:

$$p_c(J^p) = \frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J^p} \right) \quad (57)$$

Uma comparação entre as leis de endurecimento exponencial (55) e logarítmica (57) é apresentada na Figura 19 para $\phi_0 = 0.72$ e $\alpha = 2.5$. Observa-se que conforme a condição de fechamento total dos poros se aproxima, a pressão de consolidação definida pela lei logarítmica tende ao infinito, não permitindo que as deformações plásticas continuem a se desenvolver e, portanto, não permitindo haver porosidade negativa no material.

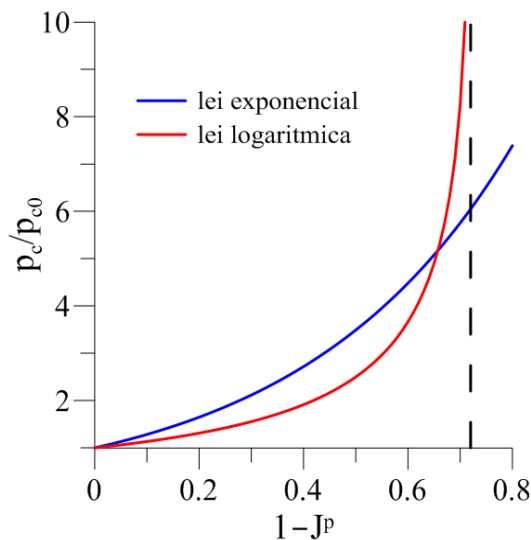


Figura 19: comparação das leis de endurecimento exponencial e logarítmica (plasticidade sem viscoplasticidade)

No quadro da poro-plasticidade-viscoplasticidade abordado neste trabalho, considera-se que as deformações puramente mecânicas e químico-mecânicas controlam de forma interdependente o comportamento do material. Desta forma, entende-se que as deformações plásticas e viscoplásticas atuam de forma conjunta no processo de evolução da pressão de consolidação plástica p_c . A lei de endurecimento proposta neste trabalho pode ser vista como uma generalização da lei desenvolvida por Barthélémy et al. (2003). O acoplamento entre a plasticidade e a viscoplasticidade se dá por meio da porosidade Euleriana definida em (47):

$$p_c(J^{ir}) = \frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J^{ir}} \right) \quad (58)$$

De forma equivalente ao raciocínio apresentado para a plasticidade finita e ilustrado na Figura 19, a expressão (58) não permite o desenvolvimento de porosidade negativa $J^{ir} > 1 - \phi_0$ e é consistente com a hipótese de que a fase sólida do esqueleto permanece incompressível durante a transformação irreversível do material.

3.2.2 Modelo viscoplástico

O modelo viscoplástico utilizado é baseado no princípio da teoria de Perzyna (1966) em conjunto com a regra de fluxo para porosidade viscoplástica definida em (42). A regra de fluxo da taxa de deformação viscoplástica é função da tensão efetiva de Terzaghi:

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \frac{1}{\eta_{vp}} \left\langle \frac{f^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}, \zeta)}{f_0} \right\rangle^n \frac{\partial g^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \quad (59)$$

η_{vp} é o coeficiente de viscosidade viscoplástico, n o expoente de viscosidade, f^{vp} a função de escoamento viscoplástica, g^{vp} o potencial viscoplástico, ζ o conjunto de variáveis de encruamento e f_0 uma tensão de referência. O símbolo $\langle \rangle$ é a notação de Macaulay:

$$\langle x \rangle = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & x \geq 0 \end{cases} \quad (60)$$

A expressão (59) é idêntica às expressões clássicas adotadas para a taxa de deformação resultante do fenômeno de pressão-solução (*IPS*) quando a difusão é a etapa que controla a velocidade do processo (SHIMIZU, 1995; ZHANG; SPIERS, 2005).

Baseado em estudos experimentais, a deformação por pressão-solução descrita pela componente viscoplástica da taxa de deformação $\underline{\underline{d}}^{vp}$ é geralmente abordada na engenharia de bacias sedimentares por meio de relações explícitas da forma (RAJ, 1982; MEER; SPIERS, 1997; MEER; SPIERS, 1999b; ZHANG; SPIERS, 2005)

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\sigma}}') \quad (61)$$

onde a expressão \mathcal{F} depende da etapa que controla a velocidade do processo de pressão-solução e incorpora as características microestruturais do material sedimentar, assim como as propriedades físico-químicas do soluto na região intergranular. Na realidade, estes modelos tentam incorporar de forma simplificada as medidas de deformação obtidas em experimentos de laboratório, geralmente realizados de forma unidimensional. A maioria destes modelos propostos na literatura relaciona a taxa de deformação volumétrica viscoplástica à tensão efetiva através de relações do tipo:

$$\text{tr } \underline{\underline{d}}^{vp} = -\mathcal{A}(-p')^\beta \quad (62)$$

O parâmetro $\mathcal{A} > 0$ é um escalar que depende da temperatura e busca incorporar as propriedades físico-químicas e microestruturais do material. O expoente $\beta \geq 1$ depende se a velocidade do processo é controlada pela difusão ($\beta \sim 1$) ou dissolução/precipitação ($\beta \sim 2-3$) (MEER; SPIERS, 1999b). Quando se utiliza um modelo teórico como apresentado em (59) para a descrição macroscópica da deformação por pressão-solução, os parâmetros associados devem ser consistentes com os modelos experimentais citados.

O modelo Cam-Clay modificado é adotado e a regra de fluxo viscoplástico é associada (Yin et al. 2006; YIN; HICHER, 2008). Define-se um critério estático p_{vp}^s para representar uma superfície de escoamento estática f_s^{vp} correspondente ao limite elástico do material, em conjunto com uma superfície dinâmica f_d^{vp} para representar seu estado de tensão efetiva (ADACHI; OKA, 1982).

$$f_d^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}', p_{vp}^d) = \frac{3}{2} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}} + M_{vp}^2 p' (p' + p_{vp}^d) = 0 \quad (63)$$

M_{vp} é a linha de estado crítico e p_{vp}^d a pressão de consolidação dinâmica viscoplástica, parâmetro que define o tamanho da superfície f_d^{vp} e pode ser obtida a partir da equação (63):

$$p_{vp}^d = -\frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}}}{M_{vp}^2} - p' \quad (64)$$

A distância entre a superfície dinâmica e a superfície estática é definida pela razão $F = \frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s}$.

Baseado nesta distância, uma função de escala $\Phi(F)$ que controla a magnitude da taxa de deformação viscoplastica é estabelecida (YIN; HICHER, 2008).

$$\Phi(F) = F - 1 = \frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \quad (65)$$

Ao invés da expressão genérica (59), a regra de fluxo viscoplástico utilizada neste trabalho é então escrita da seguinte forma:

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \frac{1}{\eta_{vp}} \langle \Phi(F) \rangle^n \frac{\partial f_d^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \quad (66)$$

Para que o modelo esteja completamente definido, resta estabelecer uma lei de endurecimento para o material. Na busca de uma lei fenomenológica que descreva adequadamente a evolução da pressão de consolidação estática p_{vp}^s , duas abordagens são adotadas. A primeira consiste em identificar a lei de endurecimento por meio da resposta do *VER* a uma compressão isótropa em conjunto a leis baseadas em experimentos que estejam disponíveis na literatura, assim como as expressões (61).

Com este objetivo, considera-se uma compressão isótropa definida pela tensão efetiva média uniforme $p' = -p_{vp}^d$ aplicada no entorno do *VER*. A tensão efetiva macroscópica correspondente é $\underline{\underline{\sigma}}' = -p_{vp}^d \underline{\underline{1}}$. Na escala macroscópica, a transformação induzida por este carregamento

ao *VER* pode ser descrita pelo Jacobiano da transformação J e pela taxa de deformação macroscópica $\underline{\underline{d}} = \frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{d}} \underline{\underline{1}} = \dot{J}/3J \underline{\underline{1}}$. Considerando $(p_{vp}^d > p_{vp}^s)$ e utilizando a equação (66) aplicada ao estado de tensão gerado pelo carregamento isótropo proposto, tem-se:

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = -\frac{M_{vp}^2}{3\eta_{vp}} \left(\frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \right)^n p_{vp}^d \underline{\underline{1}} \quad (67)$$

Utilizando a equação (61) para determinar a taxa de deformação volumétrica viscoplástica:

$$\text{tr} \underline{\underline{d}}^{vp} = \mathcal{F}(p_{vp}^d) \quad (68)$$

Combinando as equações (67) e (68), pode-se determinar uma lei de evolução para p_{vp}^s

$$p_{vp}^s = \frac{p_{vp}^d}{1 + \left(\kappa \frac{\mathcal{F}(p_{vp}^d)}{p_{vp}^d} \right)^{\frac{1}{n}}} \quad (69)$$

onde $\kappa = -\frac{\eta_{vp}}{M_{vp}^2}$. A expressão (69) relaciona o parâmetro de endurecimento p_{vp}^s ao carregamento p_{vp}^d . No entanto, este tipo de relação não pode ser precisamente interpretado como uma lei de endurecimento, pois não descreve explicitamente a ligação entre a densificação do material e a pressão de consolidação estática.

A segunda abordagem fenomenológica para a lei de endurecimento vem da ideia heurística de que a similaridade pode ser preservada entre o modelo plástico utilizado para modelar a deformação puramente mecânica e o modelo viscoplástico utilizado para modelar a deformação químico-mecânica do material e, portanto, que se pode adotar uma lei de endurecimento viscoplástica com a mesma estrutura da lei logarítmica apresentada na expressão (58) do modelo plástico. A expressão (70) apresenta a lei de evolução para p_{vp}^s , onde o escalar m é uma constante do material ($0 < m < 1$) que controla a magnitude relativa das deformações viscoplásticas em relação às deformações plásticas.

$$p_{vp}^s(J^{ir}) = p_{vp0}^s \left(\frac{\ln\left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J^{ir}}\right)}{\ln \phi_0} \right)^m \quad (70)$$

Levando em conta que o processo de compactação do material se desenvolve inicialmente devido a fenômenos puramente mecânicos, e posteriormente devido a fenômenos químico-mecânicos, o valor inicial da pressão de consolidação p_{vp0}^s é fisicamente maior que p_{c0} . Do ponto de vista matemático, as deformações viscoplásticas só acontecerão quando a condição $p_{vp}^s(J^{ir}) \leq p_c(J^{ir})$ for satisfeita. Sendo assim, a partir das leis (58) e (70), isto nunca acontecerá se $m \geq 1$. O papel do parâmetro m está ilustrado na Figura 20. Pode-se observar que quanto maior for o valor de m , mais retardado será o desenvolvimento das deformações viscoplásticas, ou seja, que o fenômeno de pressão-solução ocorrerá apenas nas camadas mais profundas de uma bacia sedimentar.

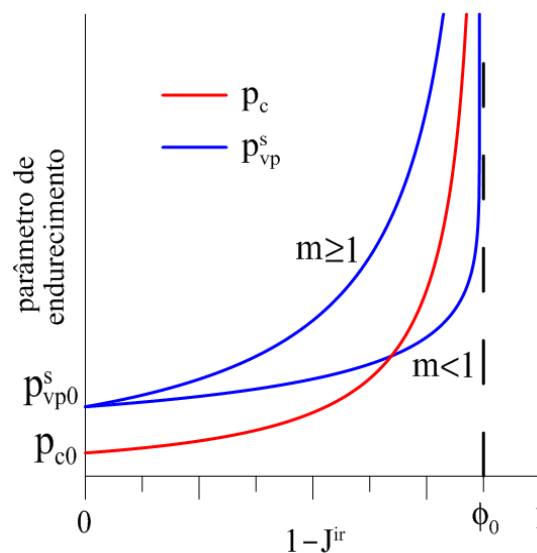


Figura 20: função do parâmetro m na lei de endurecimento viscoplástica

É importante ressaltar que o modelo Cam-Clay utilizado neste trabalho para representar a plasticidade e a viscoplasticidade do material difere em alguns aspectos do modelo Cam-Clay modificado na sua forma original, onde os módulos de compressão e cisalhamento dependem da tensão efetiva média do material, levando assim a um comportamento elástico não-linear (BORJA; LEE, 1990). Na realidade, apenas alguns aspectos referentes ao comportamento plástico do modelo original foram adotados: a regra de fluxo plástico e a superfície de plastificação. O comportamento elástico adotado neste trabalho é linear.

A abordagem fenomenológica utilizada neste trabalho para desenvolver o modelo viscoplastico, utilizado para simular a contribuição químico-mecânica no processo de compactação dos sedimentos, deve ser vista como uma abordagem preliminar na direção de uma formulação mais rigorosa para a problemática da modelagem de bacias. No entanto, ainda existe a necessidade do desenvolvimento de um modelo mais abrangente baseado em uma abordagem micromecânica especificamente para formular uma lei viscosa para deformação por pressão-solução. Neste sentido, alguns trabalhos foram desenvolvidos com o objetivo de relacionar, a partir do efeito da pressão-solução em microestruturas específicas, o comportamento viscoso macroscópico ao fenômeno químico que ocorre em uma menor escala (LEHNER, 1995; Renard et al. 1999; GHOUSSOUB; LEROY, 2001; LEHNER; LEROY, 2003).

3.2.3 Influência da porosidade sobre as propriedades poromecânicas

As grandes deformações causam grandes variações de porosidade no material, alterando de forma significativa suas propriedades poromecânicas. Portanto, o modelo constitutivo utilizado deve contar com leis que descrevam adequadamente a evolução destas propriedades em função da evolução de sua microestrutura. No presente modelo, a anisotropia gerada pelas grandes deformações irreversíveis é desconsiderada. Portanto, o material permanece isotrópico, e o único parâmetro geométrico necessário para caracterizar a evolução destas propriedades é a porosidade Euleriana φ , cuja lei de evolução está apresentada na equação (47).

Os efeitos das mudanças na microestrutura do material sobre os módulos elásticos drenados do esqueleto são avaliados a partir dos limites variacionais superiores de Hashin-Shtrikman para materiais compósitos isotrópicos com inclusões esféricas (HASHIN; SHTRIKMAN, 1963; HASHIN, 1983). Estes limites coincidem com as estimativas micromecânicas de Mori-

Tanaka (Maghous et al. 2009) e são conhecidos por modelar razoavelmente as propriedades elásticas de meios porosos isotrópicos (ZAOUI, 2002; Dormieux et al. 2006). O módulo de compressão K e o módulo de cisalhamento μ homogeneizados são funções da porosidade Euleriana φ e dos módulos de compressão e cisalhamento da fase sólida que compõe o esqueleto (considerados constantes), k^s e μ^s , respectivamente:

$$K(\varphi) = \frac{4k^s \mu^s (1-\varphi)}{3k^s \varphi + 4\mu^s} \quad (71)$$

$$\mu(\varphi) = \frac{\mu^s (1-\varphi)(9k^s + 8\mu^s)}{k^s (9 + 6\varphi) + \mu^s (8 + 12\varphi)} \quad (72)$$

O coeficiente de Biot b e o módulo de Biot M estão relacionados a φ , K e k^s através das equações (73) e (74) (Bernaud et al. 2002; COUSSY, 2004):

$$b(\varphi) = 1 - \frac{K(\varphi)}{k^s} \quad (73)$$

$$M(\varphi) = \frac{k^s}{b(\varphi) - \varphi} \quad (74)$$

Existem técnicas para avaliar de forma direta a medida de k^s , como a partir de ensaios triaxiais drenados sob compressão isotrópica, onde se mantém os incrementos de tensão hidrostática e de poro-pressão iguais ao longo do ensaio $(1/3)\text{tr}\Delta\underline{\underline{\sigma}} = \Delta p$ (Hu et al. 2010). No entanto, não é possível se obter valores para o módulo de cisalhamento μ^s de forma direta, e portanto, na prática, a determinação de ambos os parâmetros costuma ser realizada de forma indireta.

Primeiramente, $K_0(\phi_0)$ e $\mu_0(\phi_0)$ são obtidos a partir de ensaios realizados sobre o material poroso em seu estado inicial $\varphi = \phi_0$. Uma vez obtidos estes dados, eles são utilizados juntamente com ϕ_0 nas equações (71) e (72) para se obter as constantes k^s e μ^s . Desta forma, fica fácil determinar a evolução de $K(\varphi)$, $\mu(\varphi)$, $b(\varphi)$ e $M(\varphi)$, como mostram as figuras a seguir, para um material com $\phi_0 = 0.72$, $k^s = 60$ GPa e $\mu^s = 2$ GPa.

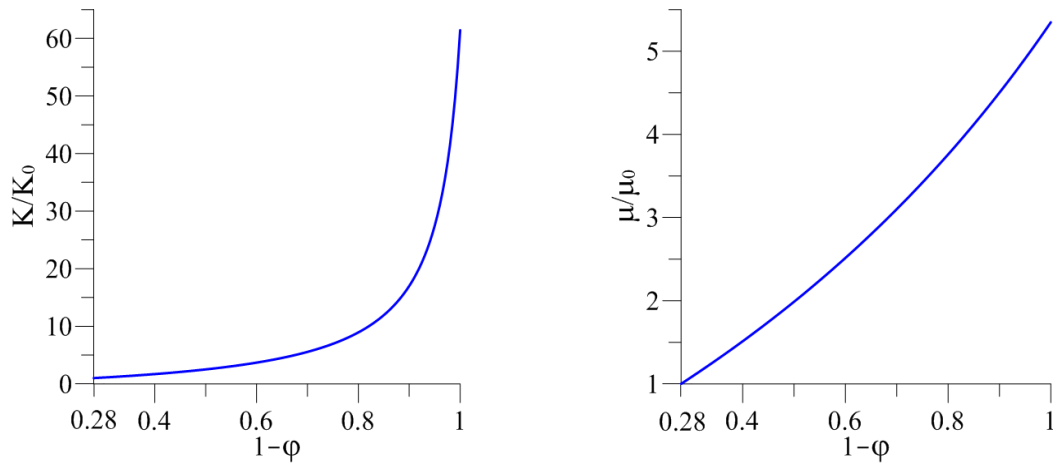


Figura 21: módulos de compressão e cisalhamento em função da porosidade

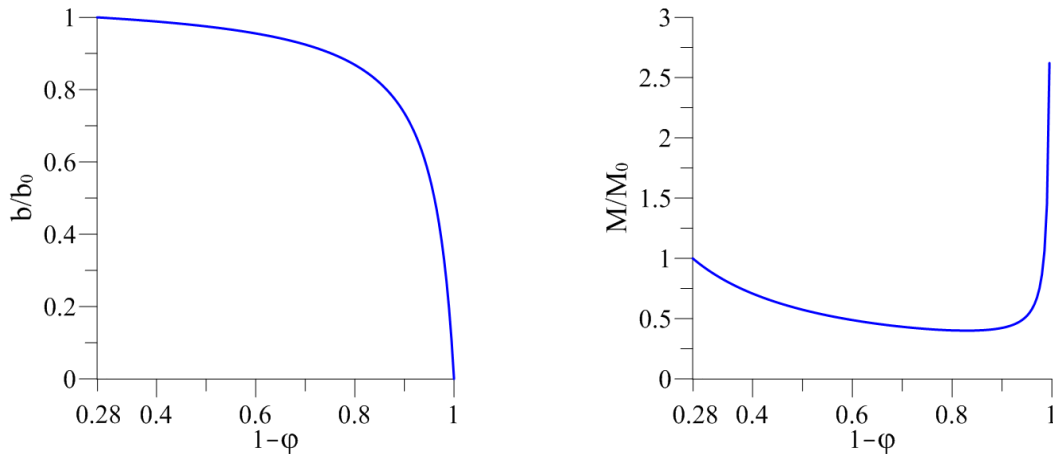


Figura 22: coeficiente e módulo de Biot em função da porosidade

Considerando a permeabilidade do meio poroso isotrópica, $\underline{\underline{K}}^f = k^f \underline{\underline{1}}$, a evolução do coeficiente de permeabilidade k^f do material é avaliada a partir do modelo de Kozeny-Carman (KOZENY, 1927; CARMAN, 1937). Apesar de alguns autores afirmarem que esta equação pode ser válida para areias, mas não para argilas (TAYLOR, 1948; LAMBE; WHITMAN, 1969), alguns estudos atuais indicam que ela pode prever razoavelmente bem a permeabilidade da maioria dos solos, incluindo as argilas (CHAPUIS; AUBERTIN, 2003). Na realidade, o estudo dos efeitos das mudanças na microestrutura do material poroso sobre a sua permeabilidade é por si só um assunto de ampla pesquisa (Dormieux et al. 2006), e o que se busca neste trabalho é apenas quantificar de forma razoável a variação da permeabilidade em função da porosidade do material. Assim, a equação de Kozeny-Carman é utilizada como apresentada em (75), onde k_0^f é a permeabilidade inicial do meio poroso (Bernaud et al. 2006).

A Figura 23 apresenta a lei de permeabilidade para $\phi_0 = 0.72$. Observa-se que para $\phi = 0.5$ a permeabilidade do material corresponde a aproximadamente 10% do seu valor inicial.

$$k^f(\phi) = k_0^f \frac{\phi^3 (1 - \phi_0)^2}{\phi_0^3 (1 - \phi)^2} \quad (75)$$

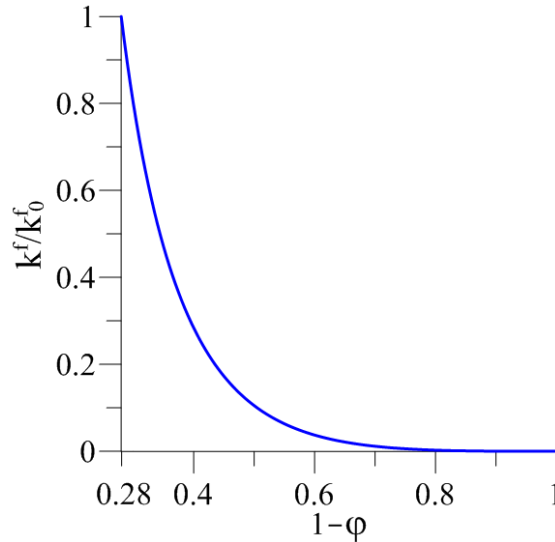


Figura 23: lei de permeabilidade em função da porosidade

3.3 ELEMENTOS DA TERMOPOROMECÂNICA

A abordagem do problema termoporomecânico na escala macroscópica baseia-se na consideração de que, em cada instante de tempo, o fluido e o esqueleto do *VER* encontram-se em equilíbrio térmico. Para a definição do problema termoporomecânico, além das equações de equilíbrio (6) e de balanço de massa fluida (7), deve-se determinar também a equação do balanço de entropia para o meio poroso, que desconsiderando os efeitos inerciais tem a forma (COUSSY, 2004):

$$T \left(\frac{dS}{dt} + \text{div}_x (s^f \underline{M}) \right) + \text{div}_x \underline{Q}^t = R^t + \Phi^s + \Phi^f \quad (76)$$

T é a temperatura, $S = S^s + \rho^f \phi s^f$ é a densidade volumétrica de entropia do material poroso definida pela soma das densidades volumétricas de entropia do esqueleto S^s e do fluido,

composta pelo produto da massa específica ρ^f , porosidade Lagrangeana ϕ , e entropia específica s^f . \underline{M} é o vetor Lagrangeano associado ao fluxo Euleriano $\underline{w} = \rho^f \underline{q}^f$ através da relação $\underline{M} = J \underline{F}^{-1} \cdot \underline{w}$, \underline{Q}^t é o fluxo térmico Lagrangeano, R^t a densidade volumétrica de geração de calor interno Lagrangeano, Φ^s e Φ^f são as dissipações volumétricas Lagrangeanas associadas ao esqueleto e ao fluido, respectivamente:

$$\Phi^s = \underline{\pi} : \frac{d\underline{\Delta}}{dt} + p \frac{d\phi}{dt} - S^s \frac{dT}{dt} - \frac{d\psi^s}{dt} \quad (77)$$

$$\Phi^f = \left(-(\underline{\nabla}_x g^f)_T + \underline{g} \cdot \underline{F} \right) \cdot \underline{M} \quad (78)$$

$\underline{\pi}$ é o segundo tensor de tensões de Piola-Kirchhoff, $\underline{\Delta}$ o tensor de deformações de Green-Lagrange, ψ^s a densidade volumétrica Lagrangeana de energia livre de Helmholtz, $(\underline{\nabla}_x g^f)_T$ o gradiente da entalpia livre específica do fluido g^f calculado à temperatura constante.

Em muitos problemas da termoporomecânica, a contribuição da geração de calor devido à deformação e variações de porosidade e energia livre no material poroso é muito menor do que a contribuição devido à variação de temperatura, e a transferência de calor por convecção e escoamento viscoso muito menor do que a transferência de calor por condução. Desta forma, os termos relativos à variação do conteúdo de massa fluida e as dissipações mecânicas associadas ao esqueleto e ao fluido na equação (76) podem ser desprezados. Este raciocínio equivale ao desacoplamento dos efeitos poromecânicos sobre a evolução local da entropia do meio poroso (BETHKE, 1985; BOOKER; SAVVIDOU, 1985; SCHREFLER, 1985; JESSOP; MAJOROWICZ, 1994; COUSSY, 2004; Stephansson et al., 2004; Wang et al., 2009; BJORLYKKE, 2010):

$$T \frac{dS}{dt} + \text{div}_x \underline{Q}^t = R^t \quad (79)$$

Por outro lado, os termos associados à variação do conteúdo de massa fluida, à deformação volumétrica do esqueleto e à variação de poro-pressão são desconsiderados na equação de estado do material, onde c é o calor específico do material à pressão e volume constantes:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\rho c}{T} \frac{dT}{dt} \quad (80)$$

Substituindo a equação de estado (80) na equação de balanço de entropia (79) e confundindo as descrições Euleriana e Lagrangeana no contexto adotado para a descrição do problema de evolução térmica, a equação de condução do calor é escrita na forma Euleriana, onde o vetor \underline{q}^t é o fluxo de calor por condução Euleriano e r^t é o calor interno Euleriano:

$$\rho c \frac{dT}{dt} + \text{div} \underline{q}^t = r^t \quad (81)$$

No contexto da problemática de bacias sedimentares, o calor interno r^t costuma estar associado à produção de calor por meio de processos radiogênicos. A lei de Fourier define o vetor fluxo de calor por condução \underline{q}^t , onde \underline{K}^t é o tensor de condutividade térmica do material:

$$\underline{q}^t = -\underline{K}^t \cdot \text{grad} T \quad (82)$$

Para resolver o problema de condução de calor, a geometria e o campo inicial de temperaturas devem ser estabelecidos, assim como as condições de contorno de fluxo térmico. Sejam S^{q^t} e S^T as partes de $\partial\Omega_t$ onde a componente normal do fluxo térmico e a temperatura são impostas, tal que $S^{q^t} \cup S^T = \partial\Omega_t$ e $S^{q^t} \cap S^T = \emptyset$, tem-se:

$$\underline{q}^t \cdot \underline{n} = q^{t,d} \text{ em } S^{q^t} \quad T = T^d \text{ em } S^T \quad (83)$$

Levando em conta os efeitos da temperatura no comportamento do material, as equações constitutivas da termoporoelasticidade linear contam com termos adicionais em relação às equações isotérmicas apresentadas em (15) e (16):

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} - \underline{\underline{B}}p - \underline{\underline{K}}^m \Delta T \quad (84)$$

$$\phi^{el} = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} + \frac{P}{M} - 3\alpha^\phi \Delta T \quad (85)$$

$\underline{\underline{K}}^m$ é o tensor dos coeficientes térmicos do esqueleto e α^ϕ o coeficiente de dilatação térmica relacionado à porosidade. Assim como $\underline{\underline{C}}$, $\underline{\underline{B}}$ e M , os termos $\underline{\underline{K}}^m$ e α^ϕ caracterizam as propriedades termoporoelásticas do material poroso na sua configuração relaxada $d\Omega_u$ e são função do gradiente de transformação irreversível $\underline{\underline{F}}^{ir}$:

$$\underline{\underline{K}}^m = \underline{\underline{K}}^m(\underline{\underline{F}}^{ir}) \quad \alpha^\phi = \alpha^\phi(\underline{\underline{F}}^{ir}) \quad (86)$$

Para um material isotrópico, o tensor de segunda ordem $\underline{\underline{K}}^m$ tem a seguinte forma, onde α^s é o coeficiente de dilatação térmica da fase sólida do esqueleto (COUSSY, 2004):

$$\underline{\underline{K}}^m = 3K\alpha^s \underline{\underline{1}} \quad (87)$$

Derivando as equações constitutivas termoporoelásticas em relação ao tempo, levando em conta a evolução das suas propriedades termoporemecânicas, chega-se às seguintes expressões, onde $\underline{\underline{\sigma}}^{te} = \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{B}}p + \underline{\underline{K}}^m \Delta T$ representa uma generalização da tensão efetiva de Biot $\underline{\underline{\sigma}}^{te}$ classicamente considerada no caso isotérmico:

$$\frac{D_J \underline{\underline{\sigma}}^{te}}{Dt} = \underline{\underline{\dot{\sigma}}}^{te} + \underline{\underline{\sigma}}^{te} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{te} = \underline{\underline{\dot{C}}} : \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{te} + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) \quad (88)$$

$$\dot{p} = M \left(\frac{\dot{\phi} - \dot{\phi}^{ir}}{J^{ir}} - \dot{b} \text{tr}(\underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{te}) - b \text{tr}(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) + 3\dot{\alpha}^\phi \Delta T + 3\alpha^\phi \dot{T} \right) + \frac{\dot{M}}{M} p \quad (89)$$

De forma equivalente às equações (20) e (21) apresentadas no caso isotérmico, o termo $\dot{\alpha}^\phi$ está associado ao efeito das grandes deformações irreversíveis sobre as propriedades termoporemecânicas do material. O coeficiente de dilatação térmica associado à porosidade α^ϕ está relacionado a α^s , b e ϕ por meio da relação (90) (COUSSY, 2004), ilustrada na Figura 24 para um material com $\phi_0 = 0.72$, $k^s = 60$ GPa e $\mu^s = 2$ GPa.

$$\alpha^\phi(\phi) = \alpha^s (b(\phi) - \phi) \quad (90)$$

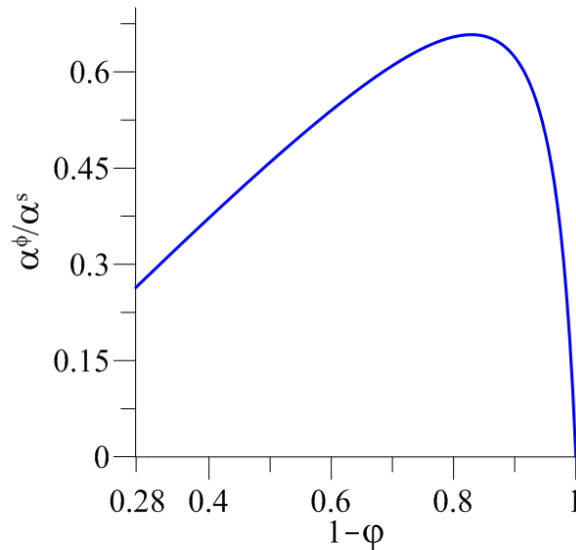


Figura 24: evolução de α^ϕ em função da porosidade

Antes de continuar com a descrição do modelo, alguns comentários a respeito do acoplamento térmico sobre o comportamento do fluido contido no meio poroso devem ser realizados. O presente modelo constitutivo aborda meios porosos saturados por um único fluido, que no caso deste trabalho se trata especificamente da água. Portanto, para que não se perca a validade do modelo utilizado, é necessário garantir que a água não troque de fase durante as simulações numéricas realizadas, o que resultaria em dois fluidos: água e vapor.

A Figura 25 apresenta o diagrama de fases da água. Observa-se que a uma pressão de 10 MPa, que corresponde a aproximadamente 1000 m de coluna d'água, a temperatura de solidificação da água é inferior a 0°C e a temperatura de ebulição superior a 300°C . Estas informações devem ser consideradas ao analisar os resultados obtidos para uma dada condição de temperatura e fluxo térmico em bacias sedimentares.

Em relação às propriedades físico-químicas da água, a pressão sob a qual ela se encontra ao longo da análise computacional é considerada apenas para garantir que ela permaneça no estado líquido, mantendo a coerência com o diagrama apresentado. Não são considerados os efeitos da pressão sobre as demais propriedades como a compressibilidade, calor específico, condutividade térmica e viscosidade. Neste trabalho a água é considerada como um fluido incompressível com massa específica constante $\rho^f = 1000 \text{ kg/m}^3$.

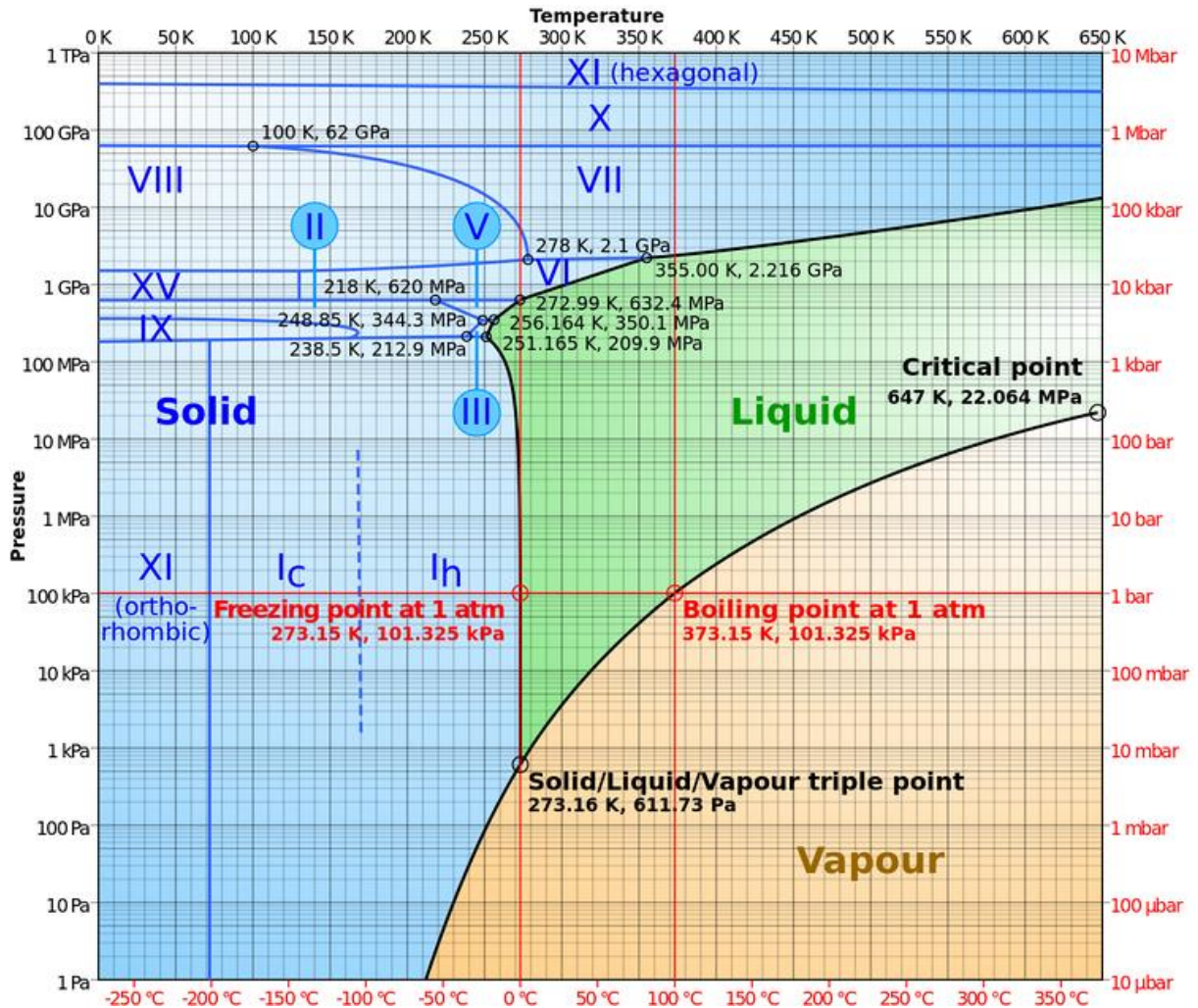


Figura 25: diagrama de fases da água (WIKIPEDIA, 2016b)

3.3.1 Influência da porosidade sobre as propriedades térmicas

Considerando a evolução da microestrutura do material poroso, a incorporação do comportamento térmico no seu modelo constitutivo requer o estabelecimento de leis que descrevam a evolução das suas propriedades térmicas em função do grau de deformação irreversível sofrida pelo material. Para o calor específico adota-se a relação usualmente utilizada para rochas saturadas, onde o calor específico do meio poroso c é calculado em função do calor específico da fase sólida do esqueleto e do fluido, c^s e c^f , respectivamente, a partir da regra da mistura ponderada pela fração de massa de cada constituinte (SOMERTON, 1992; KUTASOV, 1999; WAPLES; WAPLES, 2004a):

$$c(\varphi) = \frac{\rho^s (1-\varphi)c^s + \rho^f \varphi c^f}{\rho} \quad (91)$$

A Figura 26 apresenta a equação (91) para um material com as seguintes propriedades consideradas fixas: $\rho^s = 2300 \text{ kg/m}^3$, $\rho^f = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c^s = 800 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$, $c^f = 4200 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$.

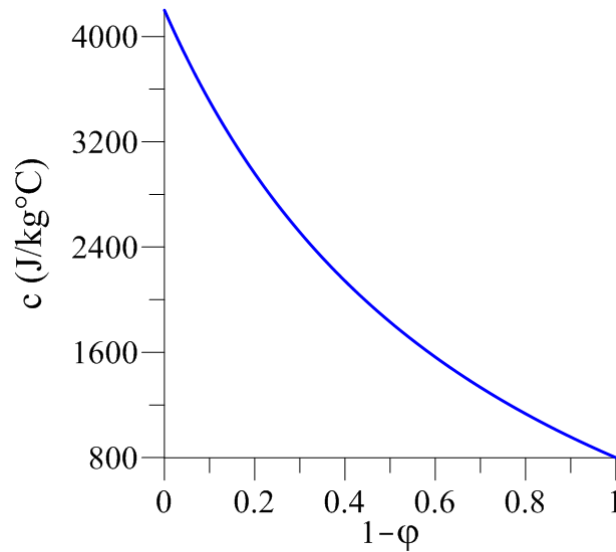


Figura 26: evolução do calor específico em função da porosidade

Desconsiderando a anisotropia eventualmente gerada pelas grandes deformações irreversíveis, considera-se que a condutividade térmica do meio poroso permanece isotrópica durante a sua evolução, $\underline{\underline{K}}^t = k^t \underline{\underline{1}}$. Dois modelos foram escolhidos para a homogeneização do coeficiente de condutividade térmica do meio poroso k^t em função do coeficiente de condutividade térmica da fase sólida do esqueleto e do fluido, $k^{t,s}$ e $k^{t,f}$, respectivamente, e da sua porosidade Euleriana φ : as estimativas micromecânicas de Mori-Tanaka (92), que coincide com os limites variacionais superiores de Hashin-Shtrikman, e a regra empírica da média geométrica (93), utilizada em muitos trabalhos encontrados na literatura (WOODSIDE; MESSMER, 1961a; WOODSIDE; MESSMER, 1961b; HASHIN; SHTRIKMAN, 1962; Vasseur et al. 1995; Gallagher et al. 1997; Midttomme et al. 1997; Mello et al. 2009; Stransky et al. 2011; Fuchs et al. 2013; CARDOSO; HAMZA, 2014). A Figura 27 ilustra as equações (92) e (93) para o caso: $k^{t,s} = 3.5 \text{ W/m}^\circ\text{C}$, $k^{t,f} = 0.6 \text{ W/m}^\circ\text{C}$.

$$k_{MT}^t(\varphi) = k^{t,s} \frac{3k^{t,f} + 2(1-\varphi)(k^{t,s} - k^{t,f})}{3k^{t,s} + (1-\varphi)(k^{t,f} - k^{t,s})} \quad (92)$$

$$k_{MG}^t(\varphi) = (k^{t,s})^{1-\varphi} (k^{t,f})^\varphi \quad (93)$$

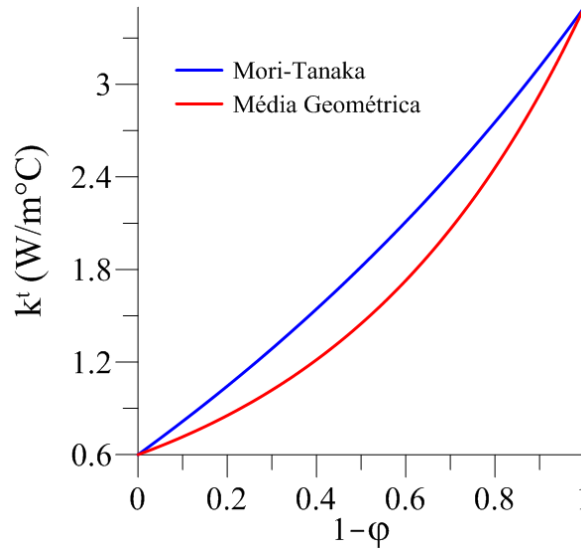


Figura 27: modelos de homogeneização do coeficiente de condutividade térmica

3.3.2 Influência da temperatura sobre as propriedades termoporomecânicas

Esta seção apresenta os modelos adotados para as leis de evolução das diferentes propriedades termoporomecânicas em função da temperatura. A influência da pressão sobre estas propriedades não é considerada.

Existem na literatura muitas informações e modelos propostos para avaliar a evolução das propriedades em função da temperatura, como o calor específico dos minerais (SOMERTON, 1992; ROBERTSON; HEMINGWAY, 1995; KUTASOV, 1999; WAPLES; WAPLES, 2004a), calor específico da água (SOMERTON, 1992; HOLMAN, 1997; WAPLES; WAPLES, 2004b), condutividade térmica dos minerais (Haenel et al. 1988; LEE; DEMING, 1998; VOSTEEN; SCHELLSCHMIDT, 2003; Abdulagatova et al. 2009), condutividade térmica da água (IAPWS, 1998), coeficiente de dilatação térmica dos minerais (AHRENS,

1995), módulo de Young e coeficiente de Poisson do material (Mao et al. 2009; Zhang et al. 2009; Brotóns et al. 2013; Sygala et al. 2013; Wu et al. 2013; Zhang et al. 2014; González-Gómez et al. 2015), coeficiente de viscosidade viscoplástica (ANGEVINE; TURCOTTE, 1983; RUTTER, 1983; Schneider et al. 1996) e viscosidade da água (HALLET, 1963; Kestin et al. 1978; IAPWS, 2003; Ulamec et al. 2007).

Entre as diversas opções de modelos existentes para a evolução das propriedades associadas ao esqueleto sólido, alguns são mais apropriados em relação a outros dependendo da composição mineralógica do material. No entanto, nesta etapa de desenvolvimento do modelo constitutivo e da ferramenta numérica computacional, não se tem como objetivo representar nenhum material específico. Sendo assim, no que diz respeito à fase sólida do esqueleto, adotou-se os modelos considerados mais convenientes do ponto de vista da implementação computacional, desde que sejam capazes de representar de forma coerente o comportamento esperado comparado ao que se encontra na literatura. Em relação a água, buscou-se representar de forma mais fiel possível a evolução das suas propriedades em função da temperatura.

3.3.2.1 Calor específico

Para o calor específico da fase sólida do esqueleto adotou-se o modelo proposto por Waples e Waples (2004a) apresentado na equação (94) que fornece o valor do calor específico c^s na temperatura T a partir do seu valor conhecido $c^s(T = 200^\circ\text{C})$ em conjunto com o coeficiente normalizado c_n^s obtido da equação (95) para a temperatura desejada. A temperatura de entrada deve estar em graus Celsius e o calor específico $c^s(T = 200^\circ\text{C})$ em $\text{J/kg}^\circ\text{C}$. A Figura 28 apresenta a função c_n^s (95).

$$c^s(T) = c_n^s(T) \times c^s(T = 200^\circ\text{C}) \quad (94)$$

$$c_n^s(T) = 0.716 + 1.72 \times 10^{-3}T - 2.13 \times 10^{-6}T^2 + 8.95 \times 10^{-10}T^3 \quad (95)$$

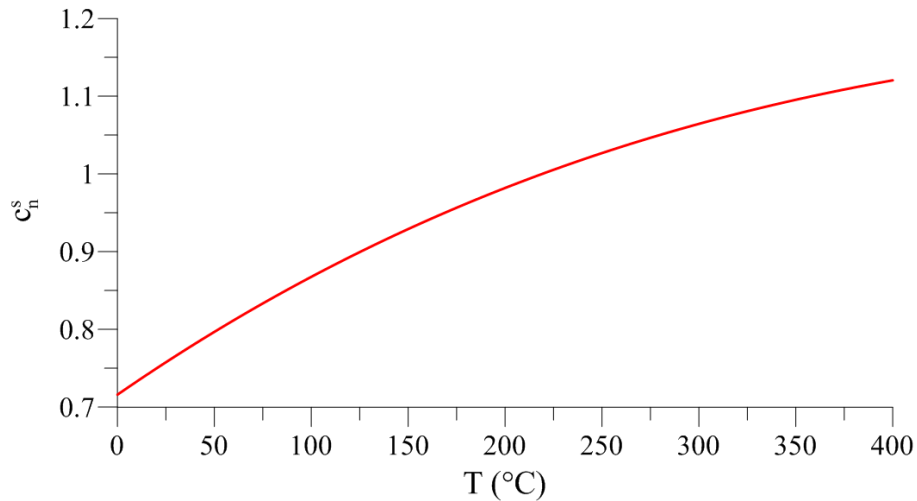


Figura 28: coeficiente c_n^s em função da temperatura

Para o calor específico da água adotou-se as equações de Somerton (1992) apresentadas na equação (96) para o intervalo de temperaturas $20^{\circ}\text{C} \leq T \leq 290^{\circ}\text{C}$ e na equação (97) para temperaturas variando entre $290^{\circ}\text{C} \leq T \leq 373^{\circ}\text{C}$. A temperatura de entrada deve estar em graus Celsius e o calor específico c^f é obtido em $\text{J}/\text{kg}^{\circ}\text{C}$. Segundo Waples e Waples (2004b), a equação (96) pode ser extrapolada até 0°C sem erros significativos. Isto é realizado neste trabalho. As equações (96) e (97) estão apresentadas na Figura 29.

$$c^f(T) = 4245 - 1.841T \quad (96)$$

$$c^f(T) = 3703 \exp\left[-4.81 \times 10^{-3}(T - 290) - 2.34 \times 10^{-4}(T - 290)^2\right] \quad (97)$$

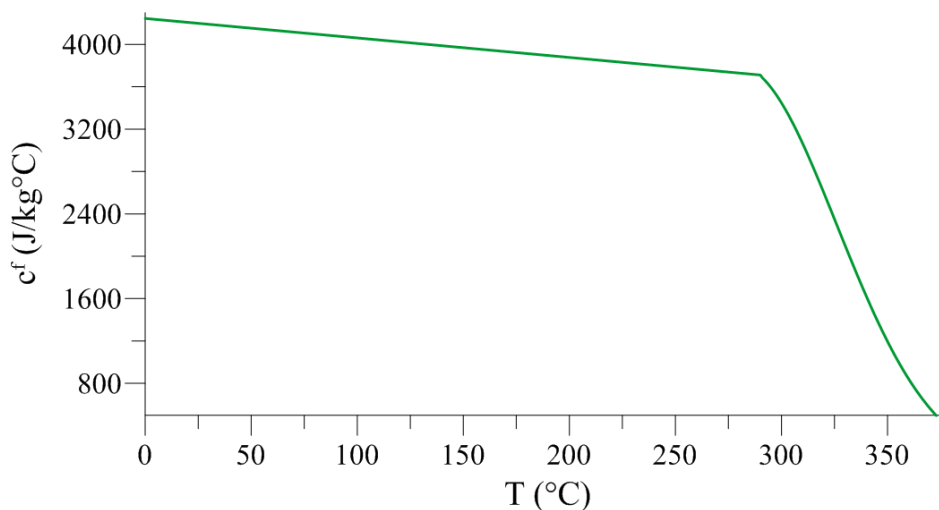


Figura 29: calor específico da água em função da temperatura

3.3.2.2 Condutividade Térmica

Para o coeficiente de condutividade térmica da fase sólida do esqueleto adotou-se o modelo apresentado na equação (98) (Abdulagatova et al. 2009). A partir de um coeficiente de condutividade térmica $k_0^{t,s}$ associado a uma temperatura de referência T_0 e uma constante de calibração A , obtém-se o coeficiente de condutividade $k^{t,s}$ na temperatura desejada T . A temperatura de entrada deve estar em graus Celsius e a condutividade térmica em $\text{W/m}^\circ\text{C}$. A Figura 30 apresenta a equação (98) para $k_0^{t,s}(T_0 = 0^\circ\text{C}) = 3.5 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ e $A = 3 \times 10^{-3}$.

$$k^{t,s}(T) = \frac{k_0^{t,s}(T_0)}{1 + A(T - T_0)} \quad (98)$$

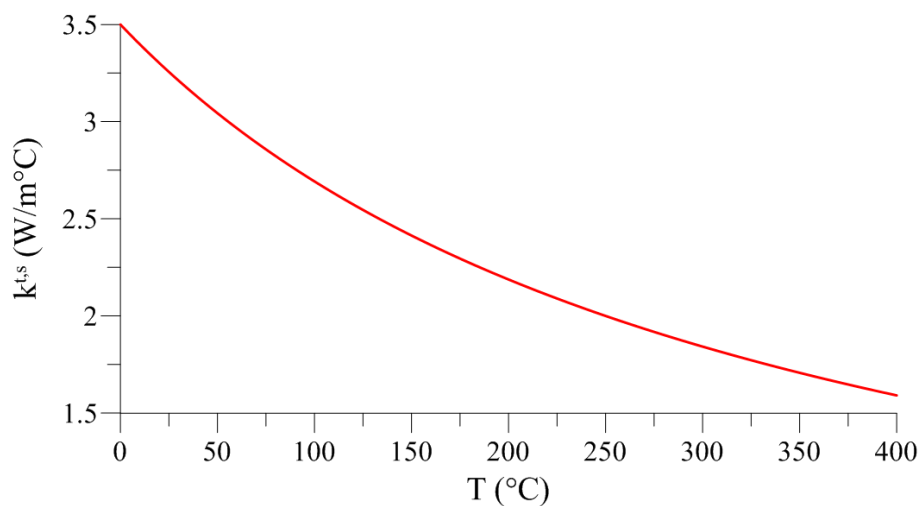


Figura 30: condutividade térmica da fase sólida em função da temperatura

Para a evolução da condutividade térmica da água utilizou-se o método dos mínimos quadrados para se obter uma função de segundo grau (99) a partir de dados da tabela disponibilizada no Apêndice E – *Values of the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance Obtained with the Aid of the Recommended Interpolating Equation for General and Scientific Use* apresentado pela *International Association for the Properties of Water and Steam* (IAPWS, 1998).

$$k^{t.f}(T) = 0.570 + 1.616 \times 10^{-3}T - 5.637 \times 10^{-6}T^2 \quad (99)$$

A temperatura de entrada deve estar em graus Celsius e a condutividade térmica é obtida em W/m°C. A Figura 31 apresenta a equação obtida para o intervalo $0^\circ\text{C} \leq T \leq 373^\circ\text{C}$:

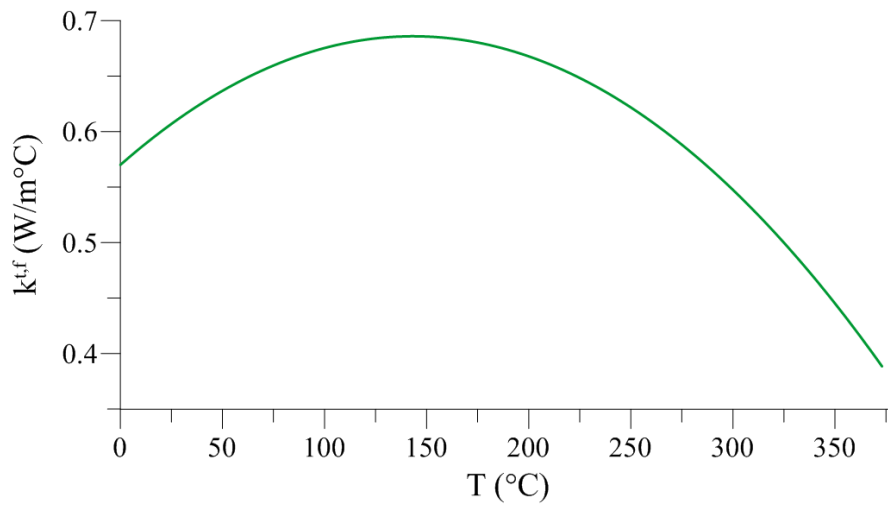


Figura 31: condutividade térmica da água em função da temperatura

3.3.2.3 Dilatação térmica

Para o coeficiente de dilatação térmica da fase sólida do esqueleto utiliza-se o polinômio apresentado na equação (100). O coeficiente de dilatação térmica α^s é obtido a partir dos coeficientes a_0 , a_1 e a_2 , calibrados em laboratório e apresentados para uma grande diversidade de minerais por Ahrens (1995). A temperatura de entrada deve estar em Kelvin. A Figura 32 apresenta a equação (100) para $a_0 = 1.64 \times 10^{-5}$, $a_1 = 5 \times 10^{-8}$ e $a_2 = -1.5$.

$$\alpha^s(T) = a_0 + a_1T + a_2T^{-2} \quad (100)$$

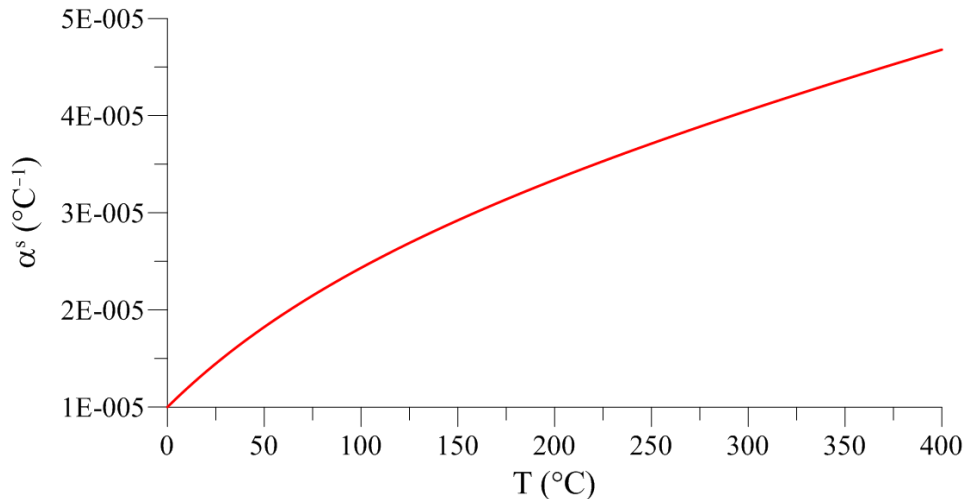


Figura 32: coeficiente de dilatação térmica da fase sólida em função da temperatura

3.3.2.4 Módulo de Young

Os diferentes trabalhos consultados na literatura apresentaram comportamentos muito distintos para as curvas de evolução do módulo de Young em função da temperatura, sem uma tendência clara a respeito do aumento ou da degradação desta propriedade. Mesmo para um determinado tipo de rocha, este comportamento pode ser bem diferente dependendo da sua formação mineralógica, como pode ser visto para os calcários de Mao et al. (2009) e González-Gómez et al. (2015), ou então para os diferentes arenitos apresentados por Zhang et al. (2009), Wu et al. (2013) e Sygala et al. (2013).

Entende-se que duas abordagens são possíveis em relação ao aumento/degradação do módulo de Young do meio poroso: 1) considerar que o aumento da rigidez vem do aumento da superfície de contato entre grãos devido a sua expansão térmica ou que a degradação da rigidez vem da geração de microfissuras devido à expansão térmica diferencial dos minerais que compõe a fase sólida do esqueleto; 2) considerar que o aumento/degradação vem diretamente da mudança nas propriedades físico-químicas destes minerais.

Na primeira abordagem pode-se manter k^s e μ^s constantes e degradar as propriedades macroscópicas K e μ em função da temperatura, baseado em dados experimentais. Na segunda, pode-se alterar as propriedades microscópicas k^s e μ^s da fase sólida do esqueleto em função da temperatura, alterando assim K e μ do meio poroso via processo de homogeneização.

Optou-se por utilizar a primeira abordagem, e uma simples função linear (101) é adotada para representar, através do coeficiente A , o aumento/degradação do módulo de elasticidade E , em função do aumento/diminuição da temperatura T , em relação a um valor de referência E_0 estabelecido para uma temperatura T_0 . A Figura 33 apresenta a equação para $A = -5 \times 10^{-4}$.

$$\frac{E(T)}{E_0(T_0)} = 1 + A(T - T_0) \quad (101)$$

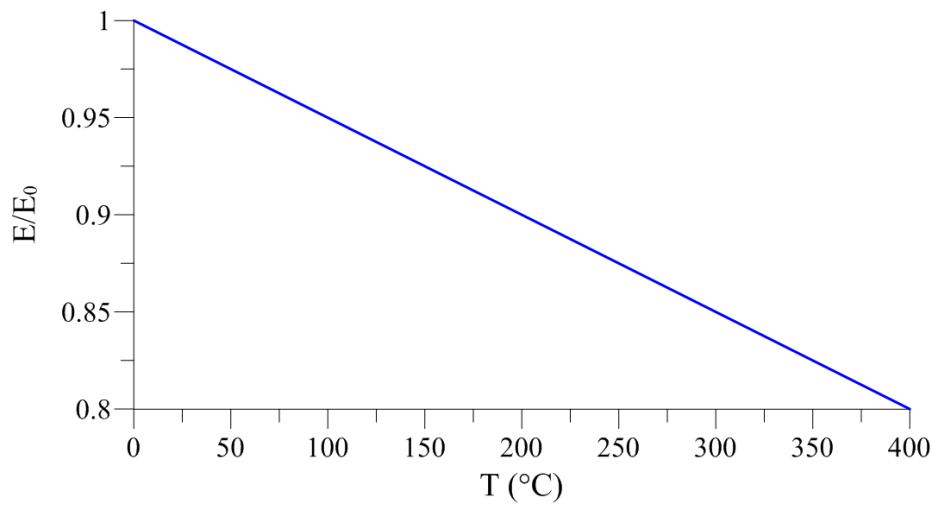


Figura 33: módulo de Young em função da temperatura

3.3.2.5 Coeficiente de viscosidade viscoplástica

O coeficiente de viscosidade η_{vp} relacionado à taxa de deformação viscoplástica utilizada para modelar o fenômeno de pressão-solução é comumente definido em função da temperatura através da equação de Arrhenius (ANGEVINE; TURCOTTE, 1983; RUTTER, 1983; Schneider et al. 1996). A forma adotada neste trabalho é obtida de Schneider et al. (1996):

$$\eta_{vp}(T) = \eta_{vp0} \exp \left[\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (102)$$

Onde η_{vp0} é o coeficiente de viscosidade na temperatura de referência T_0 , E_a é a energia de ativação em J/mol e $R=8.31 \text{ J/K}\times\text{mol}$ é a constante universal dos gases perfeitos. Angevine e Turcotte (1983) utilizaram $E_a=45\times 10^3 \text{ J/mol}$ para um arenito, Rutter utilizou $E_a=40\times 10^3 \text{ J/mol}$ para modelar caulinita e carbonato de potássio, e Schneider et al. (1996) utilizaram $E_a=40\times 10^3 \text{ J/mol}$ para giz. A temperatura de entrada deve estar em Kelvin. A

Figura 34 apresenta a evolução de $\frac{\eta_{vp}(T)}{\eta_{vp0}(T_0=273 \text{ K})}$ para diferentes valores de E_a .

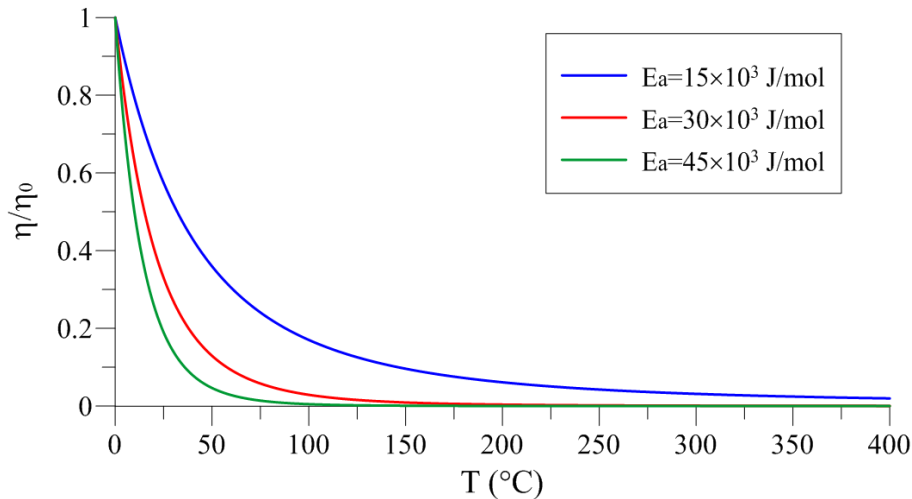


Figura 34: coeficiente de viscosidade viscoplástico em função da temperatura

3.3.2.6 Viscosidade da água

A permeabilidade de meios porosos saturados é intimamente controlada pelo espaço poroso interconectado e pela viscosidade do fluido intersticial. A partir de Hallet (1963), Kestin et al. (1978) e IAPWS (2003), a viscosidade da água líquida com pressão de saturação de $\pm 5\%$ para o intervalo de temperatura $-24^\circ\text{C} \leq T \leq 373^\circ\text{C}$ pode ser calculada com a equação (103) (Ulamec et al. 2007), onde $A=141.47 \mu\text{Pa}\times\text{s}$, $B=226.8 \text{ K}$, $\alpha=-1.5914$ e T em Kelvin.

$$\eta^f(T) = A \left(\frac{T}{B} - 1 \right)^\alpha \quad (103)$$

A equação (103) considera a evolução da viscosidade apenas em função da temperatura, embora que os ensaios para obtenção desta equação foram necessariamente realizados sob pressão controlada para que a água se mantivesse no estado líquido. A Figura 35 apresenta a evolução da viscosidade da água em função da temperatura para $0^{\circ}\text{C} \leq T \leq 373^{\circ}\text{C}$.

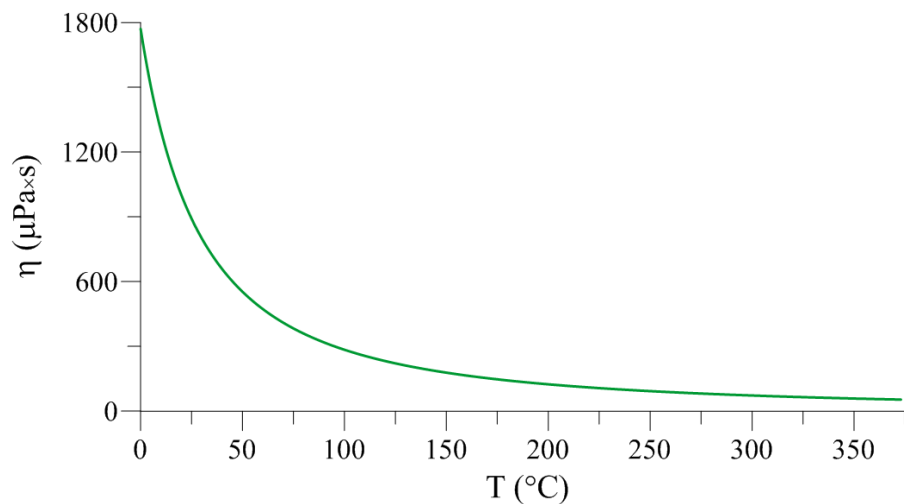


Figura 35: coeficiente de viscosidade da água em função da temperatura

A partir da consideração dos efeitos da temperatura sobre a viscosidade da água, a evolução do coeficiente de permeabilidade k^f do meio poroso, que anteriormente era considerada apenas em função da porosidade do material por meio da equação de Kozeny-Carman apresentada em (75), agora está associada também a temperatura, como mostra a equação (104), onde k_0^f é o coeficiente de permeabilidade associado a porosidade inicial ϕ_0 e temperatura T_0 , e η_0^f a viscosidade da água na temperatura T_0 .

$$\frac{k^f(\phi, T)}{k_0^f(\phi_0, T_0)} = \frac{\phi^3 (1 - \phi_0)^2 \eta_0^f(T_0)}{\phi_0^3 (1 - \phi)^2 \eta^f(T)} \quad (104)$$

Para um material com porosidade e temperatura iniciais $\phi_0 = 0.72$ e $T_0 = 0^{\circ}\text{C}$, a relação k^f/k_0^f está apresentada na Figura 36 em função da porosidade para diferentes temperaturas mantidas fixas, e na Figura 37 em função da temperatura para diferentes porosidades mantidas fixas. A curva $T = T_0 = 0^{\circ}\text{C}$ da Figura 36 corresponde à mesma curva do modelo poromecânico isotérmico fornecida pela equação (75) e apresentada na Figura 23. Como a equação

(103) indica que $\frac{\eta_0^f(T_0 = 0^\circ\text{C})}{\eta^f(150^\circ\text{C})} \approx 10$, observa-se que, para $\varphi = 0.5$, enquanto a curva $T = 0^\circ\text{C}$

fornece $k^f/k_0^f \approx 0.1$, na curva $T = 150^\circ\text{C}$ tem-se $k^f/k_0^f \approx 1$. Isto demonstra que a influência da temperatura sobre diversas propriedades físico-químicas dos materiais como, por exemplo, a viscosidade dos fluidos, pode modificar de forma efetiva as suas propriedades termoporo-mecânicas, influenciando diretamente os processos que ocorrem em bacias sedimentares.

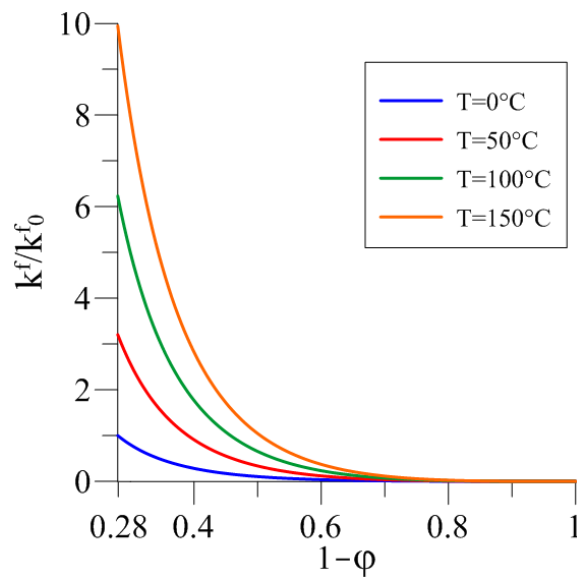


Figura 36: curvas de permeabilidade em função da porosidade

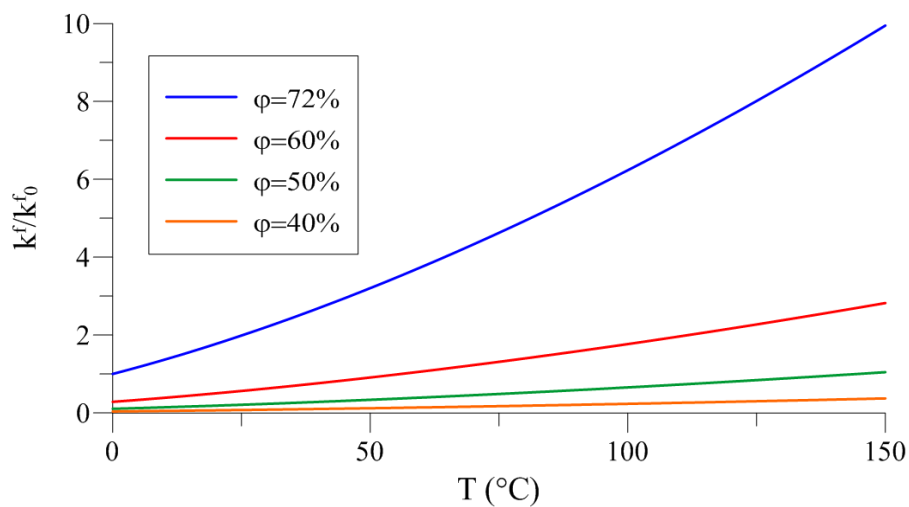


Figura 37: curvas de permeabilidade em função da temperatura

4 MODELO NUMÉRICO

Uma vez estabelecidas as equações de campo e também o modelo constitutivo do material, as discretizações temporal e espacial devem ser definidas para que se possa buscar soluções de problemas termoporomecânicos através de ferramentas numéricas. Este capítulo apresenta toda a formulação necessária para a utilização do método dos elementos finitos.

4.1 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

A condução da massa fluida através de um material poroso requer a determinação da evolução temporal dos campos desconhecidos. Supondo que os campos são conhecidos em um tempo t , o problema consiste em determinar seus valores para um novo tempo t' :

$$t' = t + \delta t \quad (105)$$

Os valores de uma variável A nos tempos t e t' são distintos através de um sobrescrito à esquerda: ${}^t A$ e ${}^{t'} A$, respectivamente. Esta regra só não é aplicada ao volume do material poroso, que mantém a notação utilizada ao longo do trabalho Ω_t e $\Omega_{t'}$.

Seja ${}^t \underline{x}$ as coordenadas no tempo t para uma determinada partícula do esqueleto e ${}^{t'} \underline{x}$ as coordenadas no tempo t' para esta mesma partícula, e seja \underline{U} o vetor deslocamento definido sobre o volume Ω_t . Define-se o vetor \underline{U} para esta partícula entre os tempos t e t' :

$$\underline{U} = {}^{t'} \underline{x} - {}^t \underline{x} \quad (106)$$

Define-se o gradiente de transformação $\underline{\underline{G}}$ do esqueleto entre os tempos t e t' como:

$$\underline{\underline{G}} = \underline{\underline{1}} + {}^t \nabla \underline{U} \quad (107)$$

Observa-se que o tensor $\underline{\underline{G}}$ não é necessariamente igual ao tensor $\underline{\underline{F}}$. Esta formulação utilizada corresponde ao método Lagrangeano atualizado. Diferentemente do método Lagrangeano total, onde todas variáveis estáticas e cinemáticas são calculadas com base na configuração inicial do problema, neste método as variáveis são calculadas utilizando como referência a última configuração calculada (BATHE, 1996). Desta forma, o transporte de um volume elementar pode ser definido da seguinte forma. A Figura 38 ilustra este caso, onde $\underline{\underline{G}} = \underline{\underline{F}}_{t \rightarrow t'}$.

$$\Omega_{t'} = \det \underline{\underline{G}} \Omega_t = J_{tt'} \Omega_t = J_{tt'} J_{0t} \Omega_0 = J_{0t'} \Omega_0 \quad (108)$$

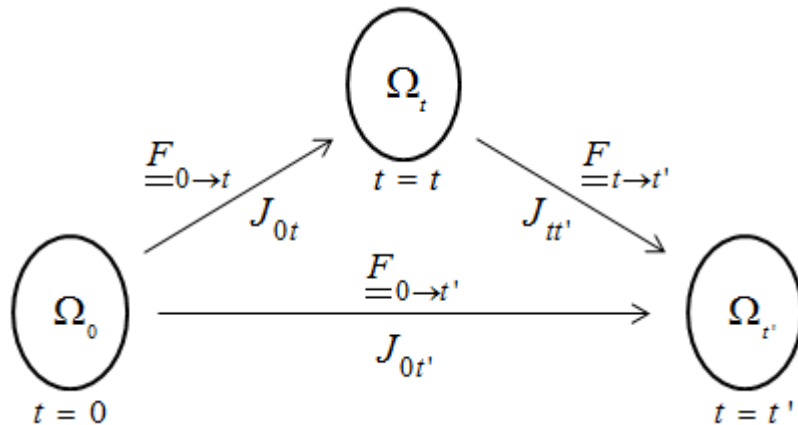


Figura 38: método Lagrangeano atualizado

Seja uma grandeza escalar ou vetorial ${}^{t'}A$ definida sobre a configuração t' . Os gradientes desta grandeza em relação às configurações Ω_t e $\Omega_{t'}$ se relacionam por:

$${}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}^{t'} A = {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}^{t'} A \cdot \underline{\underline{G}}^{-1} \quad (109)$$

Considera-se a situação de um incremento de tempo δt para o qual o gradiente de deslocamento de uma partícula do esqueleto entre os tempos t e t' é muito pequeno, $|\underline{\underline{\nabla}} U| \ll 1$. Desta forma, é possível linearizar o tensor de transformação geométrica $\underline{\underline{G}}$ e definir as seguintes aproximações de primeira ordem:

$$\underline{\underline{G}}^{-1} \approx \underline{\underline{1}} - {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}} U \quad (110)$$

$$\det \underline{\underline{G}} \approx 1 + \text{tr} \, {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}} U \quad (111)$$

As variações do tensor de tensões $\underline{\underline{\sigma}}$, da pressão p e da temperatura T entre t e t' são calculadas de forma implícita (Euler backward):

$${}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}} = \delta t {}^{t'}\underline{\underline{\dot{\sigma}}} \quad (112)$$

$${}^{t'}p - {}^tp = \delta t {}^{t'}\dot{p} = P \quad (113)$$

$${}^{t'}T - {}^tT = \delta t {}^{t'}\dot{T} = \Theta \quad (114)$$

Os tensores taxa de deformação Euleriana ${}^{t'}\underline{\underline{d}}$ e taxa de rotação ${}^{t'}\underline{\underline{\Omega}}$ são aproximados como:

$${}^{t'}\underline{\underline{d}} = \frac{1}{\delta t} \left\{ {}^t\nabla U \right\}_s = \frac{1}{\delta t} \underline{\underline{\mathcal{E}}} \quad {}^{t'}\underline{\underline{\Omega}} = \frac{1}{\delta t} \left\{ {}^t\nabla U \right\}_a \quad (115)$$

Reescrevendo a equação (88):

$$\frac{D_J \underline{\underline{\sigma}}^{ne}}{Dt} = \underline{\underline{\dot{\sigma}}}^{ne} + \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ne} = \underline{\underline{\dot{\zeta}}} : \underline{\underline{\zeta}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + \underline{\underline{\zeta}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) \quad (116)$$

Substituindo (26) e passando $\underline{\underline{\Omega}}$ para o outro lado da igualdade:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^{ne} = \underline{\underline{\dot{\zeta}}} : \underline{\underline{\zeta}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + \underline{\underline{\zeta}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^p - \underline{\underline{d}}^{vp}) - \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \quad (117)$$

A derivada temporal da tensão efetiva de Biot $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^{ne}$ é definida como:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^{ne} = \underline{\underline{\dot{\sigma}}} + \dot{b}p\underline{\underline{1}} + b\dot{p}\underline{\underline{1}} + 3\dot{K}\alpha^s \Delta T \underline{\underline{1}} + 3K\dot{\alpha}^s \Delta T \underline{\underline{1}} + 3K\alpha^s \dot{T} \underline{\underline{1}} \quad (118)$$

Analisando os termos dos produtos entre a tensão efetiva de Biot e o tensor taxa de rotação:

$$-\underline{\underline{\sigma}}^{ne} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ne} = -(\underline{\underline{\sigma}} + bp\underline{\underline{1}} + 3K\alpha^s \Delta T \underline{\underline{1}}) \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot (\underline{\underline{\sigma}} + bp\underline{\underline{1}} + 3K\alpha^s \Delta T \underline{\underline{1}}) \quad (119)$$

$$-\underline{\underline{\sigma}}^{ne} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ne} = -\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - (bp + 3K\alpha^s \Delta T) \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + (bp + 3K\alpha^s \Delta T) \underline{\underline{\Omega}} \quad (120)$$

$$-\underline{\underline{\sigma}}^{ne} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{ne} = -\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (121)$$

Substituindo (118) e (121) na equação (117):

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \dot{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^p - \underline{\underline{d}}^{vp}) - \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \\ - \dot{b} p \underline{\underline{1}} - \dot{b} \dot{p} \underline{\underline{1}} - 3 \dot{K} \alpha^s \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 K \dot{\alpha}^s \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 K \alpha^s \dot{T} \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (122)$$

Reescrevendo para t' , onde ${}^{0t'} \Delta T = {}^{t'} T - T_0$:

$$\begin{aligned} {}^{t'} \dot{\underline{\underline{\sigma}}} = {}^{t'} \dot{\underline{\underline{C}}} : {}^{t'} \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + {}^{t'} \underline{\underline{C}} : ({}^{t'} \underline{\underline{d}} - {}^{t'} \underline{\underline{d}}^p - {}^{t'} \underline{\underline{d}}^{vp}) - {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} \cdot {}^{t'} \underline{\underline{\Omega}} + {}^{t'} \underline{\underline{\Omega}} \cdot {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} \\ - {}^{t'} \dot{b} {}^{t'} p \underline{\underline{1}} - {}^{t'} \dot{b} {}^{t'} \dot{p} \underline{\underline{1}} - 3 {}^{t'} \dot{K} {}^{t'} \alpha^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^{t'} K {}^{t'} \dot{\alpha}^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^{t'} K {}^{t'} \alpha^s {}^{t'} \dot{T} \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (123)$$

Substituindo a variação do tensor de tensões $\underline{\underline{\sigma}}$ entre t e t' definido em (112):

$$\begin{aligned} {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} = {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} + \delta t \left[{}^{t'} \dot{\underline{\underline{C}}} : {}^{t'} \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + {}^{t'} \underline{\underline{C}} : ({}^{t'} \underline{\underline{d}} - {}^{t'} \underline{\underline{d}}^p - {}^{t'} \underline{\underline{d}}^{vp}) \right. \\ \left. - {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} \cdot {}^{t'} \underline{\underline{\Omega}} + {}^{t'} \underline{\underline{\Omega}} \cdot {}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} - {}^{t'} \dot{b} {}^{t'} p \underline{\underline{1}} - {}^{t'} \dot{b} {}^{t'} \dot{p} \underline{\underline{1}} \right. \\ \left. - 3 {}^{t'} \dot{K} {}^{t'} \alpha^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^{t'} K {}^{t'} \dot{\alpha}^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^{t'} K {}^{t'} \alpha^s {}^{t'} \dot{T} \underline{\underline{1}} \right] \end{aligned} \quad (124)$$

Define-se então os seguintes termos:

$$\delta t {}^{t'} \dot{\underline{\underline{C}}} = {}^{t'} \Delta \underline{\underline{C}} = {}^{t'} \underline{\underline{C}} - {}^t \underline{\underline{C}} \quad (125)$$

$$\delta t {}^{t'} \underline{\underline{d}}^p = \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p = \delta t \left[\dot{\chi} \frac{\partial G}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \right] \quad (126)$$

$$\delta t {}^{t'} \underline{\underline{d}}^{vp} = \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} = \delta t \left[\frac{1}{\eta_{vp}} \left\langle \frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \right\rangle^n \frac{\partial f_{vp}^d}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \right] \quad (127)$$

$$\delta t {}^{t'} \dot{b} = {}^{t'} \Delta b = {}^t b - {}^t b \quad (128)$$

$$\delta t {}^{t'} \dot{K} = {}^{t'} \Delta K = {}^t K - {}^t K \quad (129)$$

$$\delta t' \dot{\alpha}^s = t' \Delta \alpha^s = t' \alpha^s - {}^t \alpha^s \quad (130)$$

Substituindo (113)-(115) e (125)-(130) na equação (124):

$$\begin{aligned} {}^t \underline{\underline{\sigma}} &= {}^t \underline{\underline{\sigma}} + t' \Delta \underline{\underline{C}} : t' \underline{\underline{C}}^{-1} : t' \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + t' \underline{\underline{C}} : \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_s - t' \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p - t' \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} \\ &- t' \underline{\underline{\sigma}} \cdot \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a + \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a \cdot t' \underline{\underline{\sigma}} - t' \Delta b P \underline{\underline{1}} - t' \Delta b^t p \underline{\underline{1}} - t' b P \underline{\underline{1}} \\ &- 3 t' \Delta K t' \alpha^s \text{}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 t' K t' \Delta \alpha^s \text{}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 t' K t' \alpha^s \Theta \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (131)$$

A equação (131) é aproximada como:

$$\begin{aligned} {}^t \underline{\underline{\sigma}} &\approx {}^t \underline{\underline{\sigma}} + t' \Delta \underline{\underline{C}} : t' \underline{\underline{C}}^{-1} : t' \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + t' \underline{\underline{C}} : \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_s - t' \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p - t' \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} \\ &- t' \underline{\underline{\sigma}} \cdot \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a + \left\{ t' \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a \cdot t' \underline{\underline{\sigma}} - t' \Delta b P \underline{\underline{1}} - t' \Delta b^t p \underline{\underline{1}} - t' b P \underline{\underline{1}} \\ &- 3 t' \Delta K t' \alpha^s \text{}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 t' K t' \Delta \alpha^s \text{}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 t' K t' \alpha^s \Theta \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (132)$$

Para o raciocínio da discretização temporal da segunda equação constitutiva do problema, primeiramente reescreve-se a equação (89):

$$\dot{p} = M \left[\frac{\dot{\phi} - \dot{\phi}^{ir}}{J^{ir}} - \dot{b} \text{tr}(\underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne}) - b \text{tr}(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir}) + 3 \dot{\alpha}^\phi \Delta T + 3 \alpha^\phi \dot{T} \right] + \frac{\dot{M}}{M} p \quad (133)$$

Substituindo (26) e (38):

$$\begin{aligned} \dot{p} &= M \left[\frac{\dot{\phi}}{J^{ir}} - \text{tr}(\underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp}) - b \text{tr}(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^p - \underline{\underline{d}}^{vp}) \right. \\ &\left. - \dot{b} \text{tr}(\underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne}) + 3 \dot{\alpha}^\phi \Delta T + 3 \alpha^\phi \dot{T} \right] + \frac{\dot{M}}{M} p \end{aligned} \quad (134)$$

Substituindo (44) e agrupando os termos semelhantes:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= M \left[\frac{\dot{\phi}}{J} + (b-1) \text{tr}(\underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp}) - b \text{tr} \underline{\underline{d}} \right. \\ &\left. - \dot{b} \text{tr}(\underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^{ne}) + 3 \dot{\alpha}^\phi \Delta T + 3 \alpha^\phi \dot{T} \right] + \frac{\dot{M}}{M} p \end{aligned} \quad (135)$$

Reescrevendo para t' :

$$\begin{aligned} {}^t\dot{p} = {}^tM \left[\frac{{}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} + ({}^t b - 1) \text{tr} \left({}^t \underline{\underline{d}}^p + {}^t \underline{\underline{d}}^{vp} \right) - {}^t b \text{tr} {}^t \underline{\underline{d}} \right. \\ \left. - {}^t \dot{b} \text{tr} \left({}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \right) + 3 {}^t \dot{\alpha}^\phi {}^{0t'} \Delta T + 3 {}^t \alpha^\phi {}^t \dot{T} \right] + \frac{{}^t \dot{M}}{{}^t M} {}^t p \end{aligned} \quad (136)$$

A partir de (113):

$$\begin{aligned} P = \delta t {}^t M \left[\frac{{}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} + ({}^t b - 1) \text{tr} \left({}^t \underline{\underline{d}}^p + {}^t \underline{\underline{d}}^{vp} \right) - {}^t b \text{tr} {}^t \underline{\underline{d}} \right. \\ \left. - {}^t \dot{b} \text{tr} \left({}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \right) + 3 {}^t \dot{\alpha}^\phi {}^{0t'} \Delta T + 3 {}^t \alpha^\phi {}^t \dot{T} \right] + \delta t \frac{{}^t \dot{M}}{{}^t M} {}^t p \end{aligned} \quad (137)$$

Define-se então:

$$\delta t {}^t \dot{M} = {}^t \Delta M = {}^t M - {}^t M \quad (138)$$

$$\delta t {}^t \dot{\alpha}^\phi = {}^t \Delta \alpha^\phi = {}^t \alpha^\phi - {}^t \alpha^\phi \quad (139)$$

Reescrevendo a equação (137):

$$\begin{aligned} P = {}^t M \left[\frac{\delta t {}^t \dot{\phi}}{J_{0t'}} + ({}^t b - 1) \text{tr} \left(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} \right) - {}^t b \text{tr} \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_s \right. \\ \left. - {}^t \Delta b \text{tr} \left({}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ne} \right) + 3 {}^t \Delta \alpha^\phi {}^{0t'} \Delta T + 3 {}^t \alpha^\phi \Theta \right] + \frac{{}^t \Delta M}{{}^t M} P + \frac{{}^t \Delta M}{{}^t M} {}^t p \end{aligned} \quad (140)$$

A objetividade incremental do algoritmo é garantida através de valores pequenos de δt que permitem desprezar os termos de segunda ordem referentes ao gradiente de deslocamento, como assumido anteriormente (SIMO; HUGHES, 1998).

4.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

A formulação integral das equações diferenciais é obtida através do método dos resíduos ponderados, utilizando o método de Galerkin (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000).

4.2.1 Forma fraca da equação de equilíbrio

Escrevendo a equação (6) para o tempo t' :

$${}^t \operatorname{div} {}^t \underline{\underline{\sigma}} + {}^t \rho \underline{\underline{g}} = 0 \quad (141)$$

Multiplicando a equação por um deslocamento virtual \hat{u} definido em $\Omega_{t'}$, cujo i -ésimo componente é zero em $S_{t'}^{\xi i}$, isto é, cinematicamente admissível com valor nulo em $S_{t'}^{\xi i}$:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^t \operatorname{div} {}^t \underline{\underline{\sigma}} \cdot \hat{u} d\Omega_{t'} + \int_{\Omega_{t'}} {}^t \rho \underline{\underline{g}} \cdot \hat{u} d\Omega_{t'} = 0 \quad (142)$$

Apresenta-se a seguinte relação tensorial:

$$\operatorname{div}(\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}}) = \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{B}} + \left(\operatorname{div}^T \underline{\underline{A}} \right) \cdot \underline{\underline{B}} \quad (143)$$

Como $\underline{\underline{\sigma}}$ é um tensor simétrico, e portanto, $\operatorname{div}^T \underline{\underline{\sigma}} = \operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}}$, tem-se:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^t \underline{\underline{\sigma}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^t \operatorname{div} \left({}^t \underline{\underline{\sigma}} \cdot \hat{u} \right) d\Omega_{t'} + \int_{\Omega_{t'}} {}^t \rho \underline{\underline{g}} \cdot \hat{u} d\Omega_{t'} \quad (144)$$

Aplicando o teorema da divergência:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^t \underline{\underline{\sigma}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} d\Omega_{t'} = \int_{S_{t'}^T} {}^t \underline{\underline{T}}^d \cdot \hat{u} dS_{t'}^T + \int_{\Omega_{t'}} {}^t \rho \underline{\underline{g}} \cdot \hat{u} d\Omega_{t'} \quad (145)$$

A expressão acima é dividida em três partes para ser trabalhada de forma mais clara:

$$(E.I) = (E.II) + (E.III) \quad (146)$$

Para a expressão (E.I), utiliza-se a equação (108) para transformar o volume $d\Omega_{t'}$ em $d\Omega_t$, e a equação (109) para que o gradiente de $\underline{\hat{u}}$ seja definido sobre o tempo t :

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : ({}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} \cdot \underline{\underline{G}}^{-1}) \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t \quad (147)$$

A partir de (110) e (111), define-se o produto $\underline{\underline{G}}^{-1} \det \underline{\underline{G}}$ como:

$$\underline{\underline{G}}^{-1} \det \underline{\underline{G}} \approx \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\Gamma}} \quad (148)$$

Onde os termos de segunda ordem foram desprezados:

$$\underline{\underline{\Gamma}} = -{}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{U} + \text{tr} {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{U} \underline{\underline{1}} \quad (149)$$

Reescreve-se a expressão (E.I) como:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : [{}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} \cdot (\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\Gamma}})] d\Omega_t \quad (150)$$

Sabendo que:

$$\underline{\underline{A}} : (\underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{C}}) = (\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{A}}) : \underline{\underline{B}} \quad (151)$$

Pode-se reescrever a expressão (E.I) como:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} [(\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}] : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}\underline{\hat{u}} d\Omega_t \quad (152)$$

Para trazer a expressão (E.II) para o tempo t deve-se utilizar a transformação de uma superfície. Uma superfície material dS_t definida em t e orientada pela normal \underline{n}_t se transforma na superfície material $dS_{t'}$ definida em t' e orientada pela normal $\underline{n}_{t'}$ através da relação:

$$\underline{n}_{t'} dS_{t'} = J_{tt'} \underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{n}_t dS_t \quad (153)$$

Obtendo a norma de ambos os lados da expressão:

$$|\underline{n}_{t'} dS_{t'}| = |J_{tt'} \underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{n}_t dS_t| \quad (154)$$

Como $dS_{t'}$, dS_t e $J_{tt'}$ são escalares:

$$|\underline{n}_{t'}| dS_{t'} = \left| \underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{n}_t \right| J_{tt'} dS_t \quad (155)$$

Como o vetor normal é unitário, tem-se a expressão da transformação da superfície dS_t :

$$dS_{t'} = \left| \underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{n}_t \right| J_{tt'} dS_t \quad (156)$$

No entanto, como a transformação é lenta, a expressão (E.II) é aproximada através da simples defasagem dos coeficientes de t' para t :

$$\int_{S_{t'}} {}^{t'} \underline{T}^d \cdot \underline{\hat{u}} dS_{t'}^T \approx \int_{S_t} {}^t \underline{T}^d \cdot \underline{\hat{u}} dS_t^T \quad (157)$$

Para a expressão (E.III) considera-se a equação de balanço de massa para o tempo t' :

$${}^t \rho d\Omega_{t'} - \rho_0 d\Omega_0 = \rho^f ({}^t \phi - \phi_0) d\Omega_0 \quad (158)$$

A relação (158) significa que toda variação de massa do volume elementar poroso se dá devido à sua variação de porosidade. Da mesma forma, para o tempo t :

$${}^t \rho d\Omega_t - \rho_0 d\Omega_0 = \rho^f ({}^t \phi - \phi_0) d\Omega_0 \quad (159)$$

Isolando o termo $\rho_0 d\Omega_0$ de (159) e substituindo em (158), chega-se a seguinte relação:

$${}^t\rho d\Omega_{t'} = {}^t\rho d\Omega_t + \rho^f \left({}^t\phi - {}^t\phi \right) d\Omega_0 \quad (160)$$

Que pode ser reescrita como:

$${}^t\rho d\Omega_{t'} = {}^t\rho d\Omega_t + \rho^f \frac{\delta t {}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} d\Omega_{t'} \quad (161)$$

Substituindo em (E.III):

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^t\rho \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} {}^t\rho \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_t + \int_{\Omega_{t'}} \rho^f \frac{\delta t {}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} \quad (162)$$

Utiliza-se a equação (108) para transformar a segunda expressão do lado direito da igualdade em (162) para o tempo t :

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^t\rho \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} {}^t\rho \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_t + \int_{\Omega_{t'}} \rho^f \frac{\delta t {}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_{t'} \quad (163)$$

Após terem sido trabalhadas as expressões (E.I), (E.II) e (E.III), chega-se a (164):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_t} \left[\left(\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\Gamma}} \right) \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}} \right] : {}^t \underline{\underline{\nabla}} \underline{\hat{u}} d\Omega_t &= \int_{S_t^T} {}^t \underline{\underline{T}}^d \cdot \underline{\hat{u}} dS_t^T \\ &+ \int_{\Omega_t} {}^t\rho \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} d\Omega_t + \int_{\Omega_{t'}} \rho^f \frac{\delta t {}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}} \underline{g} \cdot \underline{\hat{u}} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_{t'} \end{aligned} \quad (164)$$

Substituindo o termo ${}^t \underline{\underline{\sigma}}$ fornecido pela expressão (132) em (E.I), e a definição (111) juntamente com o termo $\frac{\delta t {}^t\dot{\phi}}{J_{0t'}}$ fornecido pela expressão (140) na expressão (E.III), chega-se finalmente no formato desejado para a forma fraca da equação de equilíbrio, onde os coeficientes das expressões (132) e (140) foram defasados do tempo t' para o tempo t :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}} \right] d\Omega_t + \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot ({}^t \Delta \underline{\underline{C}} : {}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ve}) \right] d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot ({}^t \underline{\underline{C}} : \{ {}^t \underline{\underline{\nabla}} U \}_s - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp}) \right] d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot \left(\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}} U \}_a \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}} - {}^t \underline{\underline{\sigma}} \cdot \{ {}^t \underline{\underline{\nabla}} U \}_a \right) \right] d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot ({}^t \Delta b (P + {}^t p) + {}^t b P) \underline{\underline{1}} \right] d\Omega_t \\
& - 3 \int_{\Omega_t} {}^t \underline{\underline{\nabla}} \hat{u} : \left[(1 + \underline{\underline{\Gamma}}) \cdot ({}^t \Delta K {}^t \alpha^s {}^{0r} \Delta T + {}^t K {}^t \Delta \alpha^s {}^{0r} \Delta T + {}^t K {}^t \alpha^s \Theta) \underline{\underline{1}} \right] d\Omega_t \\
& = \int_{S_t^T} \hat{u} \cdot {}^t \underline{\underline{T}}^d dS_t^T + \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot ({}^t \rho \underline{\underline{g}}) d\Omega_t + \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left(\rho^f \frac{P}{{}^t M} \underline{\underline{g}} \right) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left(\rho^f \frac{{}^t \Delta M}{{}^t M^2} (P + {}^t p) \underline{\underline{g}} \right) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left[\rho^f ({}^t b - 1) \text{tr}(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp}) \underline{\underline{g}} \right] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left[\rho^f {}^t b \text{tr} \{ {}^t \underline{\underline{\nabla}} U \}_s \underline{\underline{g}} \right] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left[\rho^f {}^t \Delta b \text{tr} ({}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ve}) \underline{\underline{g}} \right] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t \\
& - 3 \int_{\Omega_t} \hat{u} \cdot \left[\rho^f ({}^t \Delta \alpha^{\phi} {}^{0r} \Delta T + {}^t \alpha^{\phi} \Theta) \underline{\underline{g}} \right] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t \underline{\underline{\nabla}} U) d\Omega_t
\end{aligned} \tag{165}$$

4.2.2 Forma fraca da equação de balanço de massa fluida

Para um fluido incompressível, pode-se escrever a equação (7) no tempo t' como:

$$\frac{{}^t \dot{\phi}}{J_{0t'}} + {}^t \text{div} {}^t \underline{\underline{q}}^f = 0 \tag{166}$$

Multiplicando a equação por uma pressão virtual \hat{p} definido em $\Omega_{t'}$ com valor nulo em $S_{t'}^P$:

$$\int_{\Omega_{t'}} \frac{{}^t \dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} d\Omega_{t'} + \int_{\Omega_{t'}} {}^t \text{div} {}^t \underline{\underline{q}}^f \hat{p} d\Omega_{t'} = 0 \tag{167}$$

Apresenta-se a seguinte relação tensorial:

$$\operatorname{div}(\underline{AB}) = \underline{B} \cdot \underline{\nabla}A + A \operatorname{div}\underline{B} \quad (168)$$

Aplicando (168) no segundo termo da equação (167):

$$\int_{\Omega_t} \frac{{}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} d\Omega_t - \int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{q}^f \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = - \int_{\Omega_t} {}^{t'}\operatorname{div}({}^{t'}\underline{q}^f \hat{p}) d\Omega_t \quad (169)$$

Aplicando o teorema da divergência no lado direito da igualdade:

$$\int_{\Omega_t} \frac{{}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} d\Omega_t - \int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{q}^f \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = - \int_{S_t^{qf}} {}^{t'}q^{f,d} \hat{p} dS_t^{qf} \quad (170)$$

Substituindo a lei de Darcy definida em (8) para o tempo t' e multiplicando por δt :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_t} \frac{\delta t {}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} d\Omega_t + \delta t \int_{\Omega_t} ({}^{t'}\underline{K}^f \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} {}^{t'}p) \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t \\ & - \delta t \int_{\Omega_t} ({}^{t'}\underline{K}^f \cdot \rho^f \underline{g}) \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = - \delta t \int_{S_t^{qf}} {}^{t'}q^{f,d} \hat{p} dS_t^{qf} \end{aligned} \quad (171)$$

Com o mesmo propósito que anteriormente, divide-se a equação acima em quatro partes:

$$(E.I) + (E.II) + (E.III) = (E.IV) \quad (172)$$

Para a expressão (E.I) aplica-se a equação do transporte de volume (108):

$$\int_{\Omega_t} \frac{\delta t {}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} d\Omega_t = \int_{\Omega_t} \frac{\delta t {}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} \det \underline{G} d\Omega_t \quad (173)$$

Para (E.II), primeiramente substitui-se o tensor de permeabilidade isotrópica $\underline{K}^f = k^f \underline{1}$:

$$\delta t \int_{\Omega_t} ({}^{t'}\underline{K}^f \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} {}^{t'}p) \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = \delta t \int_{\Omega_t} {}^{t'}k^f {}^{t'}\underline{\nabla} {}^{t'}p \cdot {}^{t'}\underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t \quad (174)$$

Utilizando a equação (109) para passar os gradientes de pressão para o tempo t

$${}^t \underline{\nabla} {}^t p \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} = {}^t \underline{\nabla} {}^t p \cdot \left(\underline{\underline{G}}^{-1} \cdot {}^T \underline{\underline{G}}^{-1} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} \quad (175)$$

$${}^t \underline{\nabla} {}^t p \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} \approx {}^t \underline{\nabla} {}^t p \cdot \left(\underline{\underline{1}} - 2\underline{\underline{\mathcal{E}}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} \quad (176)$$

onde $\underline{\underline{\mathcal{E}}}$ é o tensor deformação definido pela parte simétrica do gradiente de deslocamento, como mostra a equação (115). Realizando o transporte do volume Ω_t , tem-se:

$$\delta t \int_{\Omega_t} \left({}^t \underline{\underline{K}}^f \cdot {}^t \underline{\nabla} {}^t p \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = \delta t \int_{\Omega_t} {}^t k^f {}^t \underline{\nabla} {}^t p \cdot \left(\underline{\underline{1}} - 2\underline{\underline{\mathcal{E}}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t \quad (177)$$

Para expressão (E.III), substitui-se $\underline{\underline{K}}^f = k^f \underline{\underline{1}}$:

$$-\delta t \int_{\Omega_t} \left({}^t \underline{\underline{K}}^f \cdot \rho^f \underline{\underline{g}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = -\delta t \int_{\Omega_t} {}^t k^f \rho^f \underline{\underline{g}} \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t \quad (178)$$

A partir de (108) e (109):

$$-\delta t \int_{\Omega_t} \left({}^t \underline{\underline{K}}^f \cdot \rho^f \underline{\underline{g}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = -\delta t \int_{\Omega_t} {}^t k^f \rho^f \underline{\underline{g}} \cdot \left({}^t \underline{\nabla} \hat{p} \cdot \underline{\underline{G}}^{-1} \right) \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t \quad (179)$$

Sabendo que:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \left(\underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{C}} \right) = \left(\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{A}} \right) \cdot \underline{\underline{B}} \quad (180)$$

Chega-se à forma final da expressão (E.III):

$$-\delta t \int_{\Omega_t} \left({}^t \underline{\underline{K}}^f \cdot \rho^f \underline{\underline{g}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} d\Omega_t = -\delta t \int_{\Omega_t} {}^t k^f \rho^f \left(\underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{\underline{g}} \right) \cdot {}^t \underline{\nabla} \hat{p} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t \quad (181)$$

Para (E.IV), realiza-se a simples defasagem dos coeficientes de dS^{qf} de t' para t :

$$-\delta t \int_{S_t^{qf}} {}^{t'}q^{f,d} \hat{p} dS_t^{qf} \approx -\delta t \int_{S_t^{qf}} {}^tq^{f,d} \hat{p} dS_t^{qf} \quad (182)$$

Após terem sido trabalhadas (E.I), (E.II), (E.III) e (E.IV), chega-se a expressão (183):

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_t} \frac{\delta t {}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}} \hat{p} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t + \delta t \int_{\Omega_t} {}^tk^f {}^t\nabla {}^t p \cdot (\underline{\underline{1}} - 2\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \cdot {}^t\nabla \hat{p} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t \\ & - \delta t \int_{\Omega_t} {}^tk^f \rho^f (\underline{\underline{G}}^{-1} \cdot \underline{\underline{g}}) \cdot {}^t\nabla \hat{p} \det \underline{\underline{G}} d\Omega_t = -\delta t \int_{S_t^{qf}} {}^tq^{f,d} \hat{p} dS_t^{qf} \end{aligned} \quad (183)$$

Substituindo o termo $\frac{\delta t {}^{t'}\dot{\phi}}{J_{0t'}}$ fornecido em (140) na expressão (E.I), utilizando a definição

(113) nas expressões (E.II) e (E.III), assim como as relações (110) e (111), chega-se finalmente no formato desejado da forma fraca da equação de balanço de massa fluida. Na expressão (184), os coeficientes da expressão (140) foram defasados do tempo t' para o tempo t :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_t} \hat{p} \frac{P}{{}^tM} (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t - \int_{\Omega_t} \hat{p} \frac{{}^t\Delta M}{{}^tM^2} (P + {}^tp) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & - \int_{\Omega_t} \hat{p} ({}^tb - 1) \text{tr}(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp}) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & + \int_{\Omega_t} \hat{p} {}^tb \text{tr}\{ \underline{\underline{\nabla U}} \}_s (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & + \int_{\Omega_t} \hat{p} {}^t\Delta b \text{tr}({}^t\tilde{C}^{-1} : {}^t\sigma^{ve}) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & - 3 \int_{\Omega_t} \hat{p} ({}^t\Delta \alpha^{\phi 0t'} \Delta T + {}^t\alpha^{\phi} \Theta) (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & + \delta t \int_{\Omega_t} {}^t\nabla \hat{p} \cdot [{}^tk^f {}^t\nabla (P + {}^tp) \cdot (\underline{\underline{1}} - 2\underline{\underline{\mathcal{E}}})] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t \\ & - \delta t \int_{\Omega_t} {}^t\nabla \hat{p} \cdot [{}^tk^f \rho^f (\underline{\underline{1}} - {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) \cdot \underline{\underline{g}}] (1 + \underline{\underline{1}} : {}^t\nabla \underline{\underline{U}}) d\Omega_t = -\delta t \int_{S_t^{qf}} \hat{p} {}^tq^{f,d} dS_t^{qf} \end{aligned} \quad (184)$$

4.2.3 Forma fraca da equação de condução de calor

No contexto das hipóteses introduzidas na seção 3.3, escreve-se (81) para o tempo t' :

$${}^{t'}\rho^{t'}c^{t'}\dot{\hat{T}} + {}^{t'}\operatorname{div} {}^{t'}\underline{q} = {}^{t'}r \quad (185)$$

Vale lembrar que a equação precedente supõe que a variação da geometria pode ser desconsiderada para determinar a evolução da temperatura entre os instantes t e t' . Multiplicando por uma temperatura virtual \hat{T} definido em $d\Omega_{t'}$ com valor nulo em $S_{t'}^T$:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho^{t'}c^{t'}\hat{T}\dot{\hat{T}} d\Omega_{t'} + \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\operatorname{div} {}^{t'}\underline{q}\hat{T} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}r\hat{T} d\Omega_{t'} \quad (186)$$

Utilizando a relação tensorial (168):

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho^{t'}c^{t'}\hat{T}\dot{\hat{T}} d\Omega_{t'} + \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\operatorname{div} ({}^{t'}\underline{q}\hat{T}) d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{q} \cdot {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{T} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}r\hat{T} d\Omega_{t'} \quad (187)$$

Aplicando o teorema da divergência:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho^{t'}c^{t'}\hat{T}\dot{\hat{T}} d\Omega_{t'} + \int_{S_{t'}^{q'}} {}^{t'}q^{t,d}\hat{T} dS_{t'}^{q'} - \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{q} \cdot {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{T} d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}r\hat{T} d\Omega_{t'} \quad (188)$$

Substituindo a lei de Fourier definida em (82) para o tempo t' e multiplicando por δt :

$$\begin{aligned} & \delta t \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho^{t'}c^{t'}\hat{T}\dot{\hat{T}} d\Omega_{t'} + \delta t \int_{S_{t'}^{q'}} {}^{t'}q^{t,d}\hat{T} dS_{t'}^{q'} \\ & + \delta t \int_{\Omega_{t'}} ({}^{t'}\underline{K}^t \cdot {}^{t'}\underline{\nabla}{}^{t'}T) \cdot {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{T} d\Omega_{t'} = \delta t \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}r\hat{T} d\Omega_{t'} \end{aligned} \quad (189)$$

Substituindo (114) e o tensor de condutividade térmica isotrópica $\underline{K}^t = k^t \underline{1}$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho^{t'}c\Theta\hat{T} d\Omega_{t'} + \delta t \int_{S_{t'}^{q'}} {}^{t'}q^{t,d}\hat{T} dS_{t'}^{q'} \\ & + \delta t \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}k^t \underline{\nabla}(\Theta + {}^{t'}T) \cdot {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{T} d\Omega_{t'} = \delta t \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}r\hat{T} d\Omega_{t'} \end{aligned} \quad (190)$$

A forma final da equação é obtida considerando a geometria fixa ($\Omega_t \approx \Omega_{t'}$) e defasando os demais coeficientes das propriedades térmicas do tempo t' para o tempo t :

$$\int_{\Omega_t} \hat{T}^t \rho^t c \Theta d\Omega_t + \delta t \int_{S_t^{q'}} \hat{T}^t q^{t,d} dS_t^{q'} + \delta t \int_{\Omega_t} \underline{\nabla} \hat{T} \cdot [{}^t k^t \underline{\nabla} (\Theta + {}^t T)] d\Omega_t = \delta t \int_{\Omega_t} \hat{T}^t r d\Omega_t \quad (191)$$

4.3 ASPECTOS COMPUTACIONAIS

Alguns aspectos computacionais fundamentais referentes à implementação do modelo numérico apresentado estão descritos a seguir.

4.3.1 Elementos utilizados e sistemas de equações

O método da superposição de elementos é utilizado para a solução do problema termoporo-mecânico (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000). Foram adotados elementos com a mesma forma geométrica, mas com funções de interpolação de grau diferentes para a representação das incógnitas do problema. Os elementos são sobrepostos e pertencem aos mesmos nós globais. Conforme a malha se deforma, os elementos utilizados para o cálculo das pressões e temperaturas acompanham nó a nó os elementos utilizados para o cálculo dos deslocamentos.

Para a aproximação dos deslocamentos é utilizado o elemento hexaédrico isoparamétrico quadrático de 20 nós, com 3 graus de liberdade por nó: deslocamento nas direções x , y e z (DHATT; TOUZOT, 1984). A Figura 39 ilustra o elemento, seus eixos locais ξ , η e ζ , e a posição e identificação de cada um de seus nós.

As funções de interpolação N_i dos nós dos vértices (1 a 8) são representadas pela expressão:

$$N_i(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) = \frac{1}{8} (1 + \xi \xi_i) (1 + \eta \eta_i) (1 + \zeta \zeta_i) (-2 + \xi \xi_i + \eta \eta_i + \zeta \zeta_i) \quad (192)$$

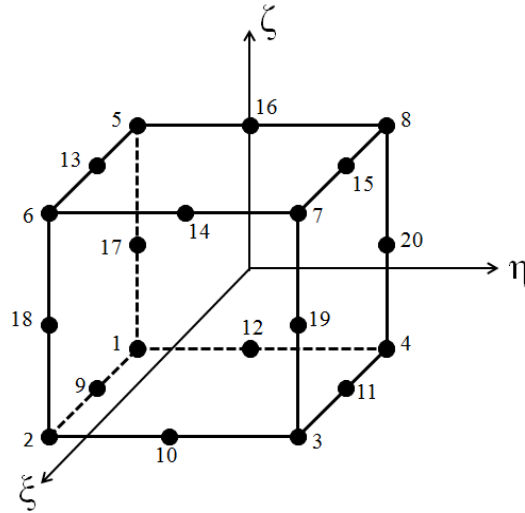


Figura 39: elemento hexaédrico de 20 nós

As funções de interpolação dos nós pertencentes ao plano $\zeta_i = 0$ (9, 11, 13, 15) são:

$$N_i(\eta_i, \zeta_i) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(1 + \eta\eta_i)(1 + \zeta\zeta_i) \quad (193)$$

Para os nós pertencentes ao plano $\eta_i = 0$ (10, 12, 14, 16) tem-se:

$$N_i(\xi_i, \zeta_i) = \frac{1}{4}(1 + \xi\xi_i)(1 - \eta^2)(1 + \zeta\zeta_i) \quad (194)$$

E para o plano $\zeta_i = 0$ (17, 18, 19, 20):

$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \frac{1}{4}(1 + \xi\xi_i)(1 + \eta\eta_i)(1 - \zeta^2) \quad (195)$$

Para a aproximação da pressão e temperatura é utilizado o elemento hexaédrico isoparamétrico linear de 8 nós, com 1 grau de liberdade por nó: a pressão ou a temperatura. A Figura 40 apresenta o elemento, seus eixos locais e a posição e identificação de cada um de seus nós.

Suas funções de interpolação \tilde{N}_i são representadas pela expressão:

$$\tilde{N}_i(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) = \frac{1}{8}(1 + \xi\xi_i)(1 + \eta\eta_i)(1 + \zeta\zeta_i) \quad (196)$$

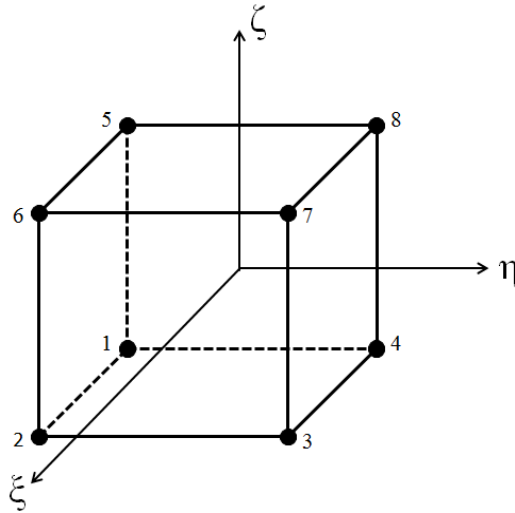


Figura 40: elemento hexaédrico de 8 nós

Uma vez definido o elemento e suas funções de forma, pode-se finalmente montar o problema a partir das expressões (165), (184) e (191). Para cada incremento de tempo, a solução do problema termoporomecânico é realizada em duas etapas distintas. Na primeira etapa obtém-se a variação do campo de temperaturas a partir da solução do problema de condução de calor (191). Na segunda etapa obtém-se o campo de deslocamentos e pressões a partir da solução do problema poromecânico definido pelas equações de equilíbrio (165) e de balanço de massa fluida (184) (FELIPPA; PARK, 1980; Zienkiewicz et al. 1988; Turska et al. 1994; Schrefler et al. 1997; LEWIS; SCHREFLER, 1998; Felippa et al. 2001; Kim et al. 2011).

Os sistemas de equações resultantes estão apresentados em (197) e (198), onde $\underline{\underline{K}}_{II}$ são as sub-matrizes de rigidez globais, \underline{F}_I os sub-vetores de força globais, e os vetores \underline{U} , \underline{P} e \underline{T} são os vetores deslocamentos, variações de pressão e variações de temperatura nodais, respectivamente. Para uma dada configuração no tempo t , o sistema de equações (198) é altamente não-linear devido as não-linearidades físicas (plasticidade e viscoplasticidade) e geométricas (grandes deformações). Em particular, os vetores \underline{F}_U e \underline{F}_P dependem das incógnitas do problema poromecânico, isto é, $\underline{F}_U = \underline{F}_U(\underline{U}, \underline{P})$ e $\underline{F}_P = \underline{F}_P(\underline{U}, \underline{P})$.

$$\underline{\underline{K}}_{TT} \cdot \underline{T} = \underline{F}_T \quad (197)$$

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}_{UU} & \underline{\underline{K}}_{UP} \\ \underline{\underline{K}}_{PU} & \underline{\underline{K}}_{PP} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{U} \\ \underline{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{F}_U - \underline{\underline{K}}_{UT} \cdot \underline{T} \\ \underline{F}_P - \underline{\underline{K}}_{PT} \cdot \underline{T} \end{bmatrix} \quad (198)$$

Para um único elemento, a matriz $\underline{\underline{K}}_{UU}$ tem dimensões 60×60 , $\underline{\underline{K}}_{UP}$ e $\underline{\underline{K}}_{UT}$ 60×8 , $\underline{\underline{K}}_{PU}$ 8×60 , $\underline{\underline{K}}_{PP}$, $\underline{\underline{K}}_{PT}$ e $\underline{\underline{K}}_{TT}$ 8×8 . Portanto, $\underline{\underline{F}}_U$ tem dimensões 60×1 , $\underline{\underline{F}}_P$ e $\underline{\underline{F}}_T$ 8×1 . O sistema de equações (197) tem como incógnitas 8 variações de temperaturas nodais e o sistema de equações (198) tem como incógnitas 60 deslocamentos e 8 variações de pressão nodais.

A matriz $\underline{\underline{K}}_{UU}$ é simétrica positiva definida, $\underline{\underline{K}}_{PP}$ simétrica negativa definida e as matrizes $\underline{\underline{K}}_{UP} = {}^T \underline{\underline{K}}_{PU}$, o que faz com que o sistema de equações (198) seja simétrico indefinido. A matriz $\underline{\underline{K}}_{TT}$ é simétrica positiva definida. Todos os termos que compõe os sistemas de equações (197) e (198), assim como todas as matrizes e vetores elementares utilizados na formulação do problema termoporomecânico estão apresentados no Apêndice A.

4.3.2 Estrutura de dados e processamento

A modelagem numérica de grandes problemas de engenharia por meio do método dos elementos finitos costuma exigir grande capacidade computacional devido ao elevado número de variáveis envolvidas que devem ser resolvidas e armazenadas na memória do computador. O sistema de equações resultante da discretização espacial do problema costuma ser muito grande e com alto grau de esparsidade, levando a um grande desperdício de memória, mesmo utilizando técnicas eficientes para a reordenação dos nós da malha. Se a análise for não-linear, as dificuldades computacionais aumentam, já que o sistema de equações deve ser resolvido de forma iterativa até que se obtenha uma solução considerada satisfatória para o problema. No caso de problemas transientes, o tempo de processamento aumenta proporcionalmente ao número de passos de tempo utilizado. Portanto, para o caso das simulações tridimensionais de bacias sedimentares envolvidas neste trabalho no contexto da termoporomecânica, onde se trata de um problema altamente não-linear, em uma escala de tempo geológica que necessita de uma significativa discretização temporal, e que envolve graus de liberdade de deslocamento, pressão e temperatura, fica evidente a importância da utilização de técnicas computacionais apropriadas para a montagem do problema e solução do sistema de equações.

Para melhorar a velocidade de processamento dos dados é utilizada o *OpenMP (Open Multi-Processing)*. Trata-se de uma interface de programação de aplicativos em ambientes de me-

mória compartilhada que permite a utilização de um determinado número de processadores locais de forma coordenada para se obter uma maior capacidade global de processamento através da execução simultânea de tarefas, que se comunicam compartilhando os dados da memória (Chapman et al. 2008). A escolha sobre a utilização deste método em relação a outras possibilidades mais eficientes como *GPU (Graphics Processing Unit)* e *MPI (Message Passing Interface)* foi devido a facilidade de implementação no código de elementos finitos.

Adicionalmente à utilização de métodos de multi-processamento, o uso de uma estrutura de dados apropriada é crucial para se atingir uma boa relação *performance × espaço de armazenamento* do algoritmo. Além de economizar memória computacional não armazenando termos nulos da matriz de rigidez, uma estrutura de dados eficiente pode aumentar a velocidade de muitas operações matemáticas básicas como, por exemplo, os produtos matriz-vetor, que costumam definir o desempenho global de rotinas de solução de sistemas de equações através de métodos iterativos (RIBEIRO; COUTINHO, 2005).

4.3.2.1 Estrutura de dados

O sistema de armazenamento de dados utilizado neste trabalho é o *CSR (Compressed Sparse Row)*. Seja $\underline{\underline{A}}$ uma matriz quadrada simétrica, correspondente aos coeficientes de um sistema de n equações lineares, $\underline{\underline{A}}(n \times n)$, e $2m$ o número de posições não-nulas fora da sua diagonal principal. A estrutura de dados utilizada para armazenar esta matriz no formato *CSR* consiste em três vetores: um vetor de dados $\underline{\underline{AA}}(n+m)$, e dois vetores ponteiros $\underline{\underline{JA}}(n+m)$ e $\underline{\underline{IA}}(n+1)$. No vetor $\underline{\underline{AA}}$ os valores A_{ij} não-nulos são armazenados linha por linha ($i=1 \rightarrow n$), coluna por coluna ($j=1 \rightarrow n$). No caso de matrizes simétricas, apenas a parte superior da matriz é armazenada. O vetor $\underline{\underline{JA}}$ contém os índices das colunas j dos termos A_{ij} ($j \geq i$) armazenados no vetor $\underline{\underline{AA}}$. A posição i do vetor $\underline{\underline{IA}}$ aponta para o primeiro valor armazenado da linha i no vetor $\underline{\underline{AA}}$, e portanto a diferença $\underline{\underline{IA}}(i+1) - \underline{\underline{IA}}(i)$ indica quantos termos da linha i estão sendo armazenados (SAAD, 2003).

O produto matriz-vetor $\underline{\underline{p}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{u}}$ para uma matriz simétrica $\underline{\underline{A}}$ armazenada no formato *CSR* e um vetor $\underline{\underline{u}}$ qualquer está apresentado no algoritmo da Figura 41.

```

loop nas equações:
do i = 1, n
  ui = u(i)
  iai = IA(i)
  t = AA(iai) × ui
  loop sobre os termos não nulos da equação i:
  do k = IA(i) + 1, IA(i + 1) - 1
    jak = JA(k)
    s = AA(k)
    t = t + s × u(jak)
    p(jak) = p(jak) + s × ui
  enddo
  p(i) = p(i) + t
enddo

```

Figura 41: produto matriz-vetor utilizando CSR

4.3.2.2 Solução do sistema de equações

Dois métodos de solução de sistema de equações foram adotados: um direto e um iterativo. Esta escolha foi feita devido a variação da efetividade que pode haver entre métodos diretos e iterativos em relação a certos fatores como o número de incógnitas do problema e o número de condicionamento da matriz de coeficientes. O método direto de solução é utilizado diretamente das rotinas *MKL PARDISO* (*Parallel Direct Sparse Solver Interface*) do pacote *Intel MKL* (*Intel Math Kernel Library*), uma biblioteca de rotinas disponíveis em *Fortran* otimizadas para operações matemáticas em plataformas com interface de multiprocessamento, como o *OpenMP* (INTEL, 2016). A solução do sistema de equações (197) é realizada a partir da decomposição $\underline{\underline{L}} \cdot {}^T \underline{\underline{L}}$ de Cholesky e a solução do sistema de equações (198) é realizada utilizando a decomposição $\underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{D}} \cdot {}^T \underline{\underline{L}}$.

Antes de abordar o método iterativo adotado, é importante realizar alguns comentários a respeito do sistema de equações (198). Para obter a simetria deste sistema, a forma fraca da equação do balanço de massa fluida foi multiplicada por δt (na passagem da equação (170) para (171)) e posteriormente multiplicada por -1 (na passagem da equação (184) para a for-

ma matricial (198)), resultando em $\underline{\underline{K}}_{PU} = {}^T \underline{\underline{K}}_{UP}$. No entanto, esta última operação algébrica resultou em uma matriz $\underline{\underline{K}}_{PP}$ negativa definida, tornando o sistema (198) indefinido, o que pode ser um complicador em relação a utilização de certos métodos iterativos disponíveis na literatura. Justifica-se a forma adotada neste trabalho em função da simetria obtida em (198), que reduz a demanda de memória computacional para armazenar a matriz de coeficientes.

Uma abordagem similar a adotada neste trabalho pode ser encontrada na literatura por diversos autores: Sandhu e Wilson (1969), Booker e Small (1975), Krause (1978), Borja (1986), Bernaud et al. (2002), Phoon et al. (2002), Bergamaschi et al. (2007). Outros autores optam por trabalhar o sistema de equações de outras formas, como pode ser visto nos trabalhos de Zienkiewicz et al. (1978), Lewis e Schrefler (1998), Sloan e Abbo (1999), Ferronato et al. (2001), Kim et al. (2011).

O método iterativo de solução do sistema de equações adotado é o método dos Gradientes Conjugados Pré-condicionado (*PCG - Preconditioned Conjugate Gradient*) com matriz pré-condicionadora $\underline{\underline{M}}$ diagonal. Sua escolha baseia-se no fato de ser um método de fácil implementação e que envolve apenas um produto matriz-vetor para cada iteração realizada, o que o torna um método eficiente para solução de sistemas com elevado número de graus de liberdade. Para um sistema de equações $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$, o algoritmo de solução utilizado é apresentado na Figura 42 (SAAD, 2003). A convergência do algoritmo é verificada em função do vetor resíduo \underline{r} de acordo com a equação (199).

Calcule $\underline{r}_0 = \underline{b} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}_0$, $\underline{z}_0 = \underline{\underline{M}}^{-1} \cdot \underline{r}_0$, e $\underline{p}_0 = \underline{z}_0$

Para $j = 0, 1, \dots$, até a convergência:

$$1. \alpha_j = (\underline{r}_j \cdot \underline{z}_j) / (\underline{p}_j \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \underline{p}_j)$$

$$2. \underline{x}_{j+1} = \underline{x}_j + \alpha_j \underline{p}_j$$

$$3. \underline{r}_{j+1} = \underline{r}_j - \alpha_j \underline{\underline{A}} \cdot \underline{p}_j$$

$$4. \underline{z}_{j+1} = \underline{\underline{M}}^{-1} \cdot \underline{r}_{j+1}$$

$$5. \beta_j = (\underline{r}_{j+1} \cdot \underline{z}_{j+1}) / (\underline{r}_j \cdot \underline{z}_j)$$

$$6. \underline{p}_{j+1} = \underline{z}_{j+1} + \beta_j \underline{p}_j$$

Figura 42: algoritmo PCG

$$\frac{\sqrt{r_{j+1} \cdot \underline{\underline{M}}^{-1} \cdot r_{j+1}}}{\sqrt{r_0 \cdot \underline{\underline{M}}^{-1} \cdot r_0}} \leq TOL \quad (199)$$

Embora o método dos Gradientes Conjugados seja desenvolvido para resolver sistemas de equações lineares simétricos positivos definidos, como é o caso de (197), existem trabalhos que demonstram que ele pode ser aplicado mesmo a problemas com matrizes indefinidas, como (198), embora possa apresentar certas instabilidades numéricas (Paige et al. 1995; VORST, 2003). De fato, verificou-se que, esporadicamente, o algoritmo apresenta instabilidades que levam a não convergência da solução do sistema de equações (198). Para os problemas reproduzidos neste trabalho, este fenômeno aconteceu com uma frequência considerada muito baixa. Sendo assim, optou-se por permanecer utilizando o *PCG*, em conjunto com o algoritmo apresentado na Figura 43. Para os problemas em que o método iterativo é computacionalmente mais eficiente, utiliza-se o solver iterativo *PCG*. Caso este venha a falhar para um determinado passo de tempo da análise, o programa utiliza momentaneamente o recurso do solver direto *PARDISO*, mesmo que pontualmente se tenha um custo computacional mais elevado. Uma vez que a solução deste passo de tempo é obtida, volta-se a utilizar o *PCG* para a etapa seguinte.

É importante ressaltar que, embora tenham sido implementadas algumas ferramentas de otimização computacional, como as diretivas do *OpenMP* para realizar o processamento dos dados em paralelo com memória compartilhada, e a adoção da estrutura de dados *CSR* para redução do uso de memória computacional, ainda há muito o que ser feito em termos de computação de alto desempenho (*HPC - High-performance Computing*). Existem diversas áreas a serem exploradas como a incorporação de pré-condicionadores mais evoluídos, diferentes algoritmos de solução do sistema de equações e o processamento de dados em placas gráficas (*GPU*) e memória distribuída (*MPI*) (Chen et al. 2007; RIBEIRO; FERREIRA, 2007; Willien et al. 2009; HAGER; WELLEIN, 2011; BERGAMASCHI; MARTINEZ, 2012; FERRONATO, 2012; Ferronato et al. 2012; Kardani et al. 2015; Mattila et al. 2016; White et al. 2016).

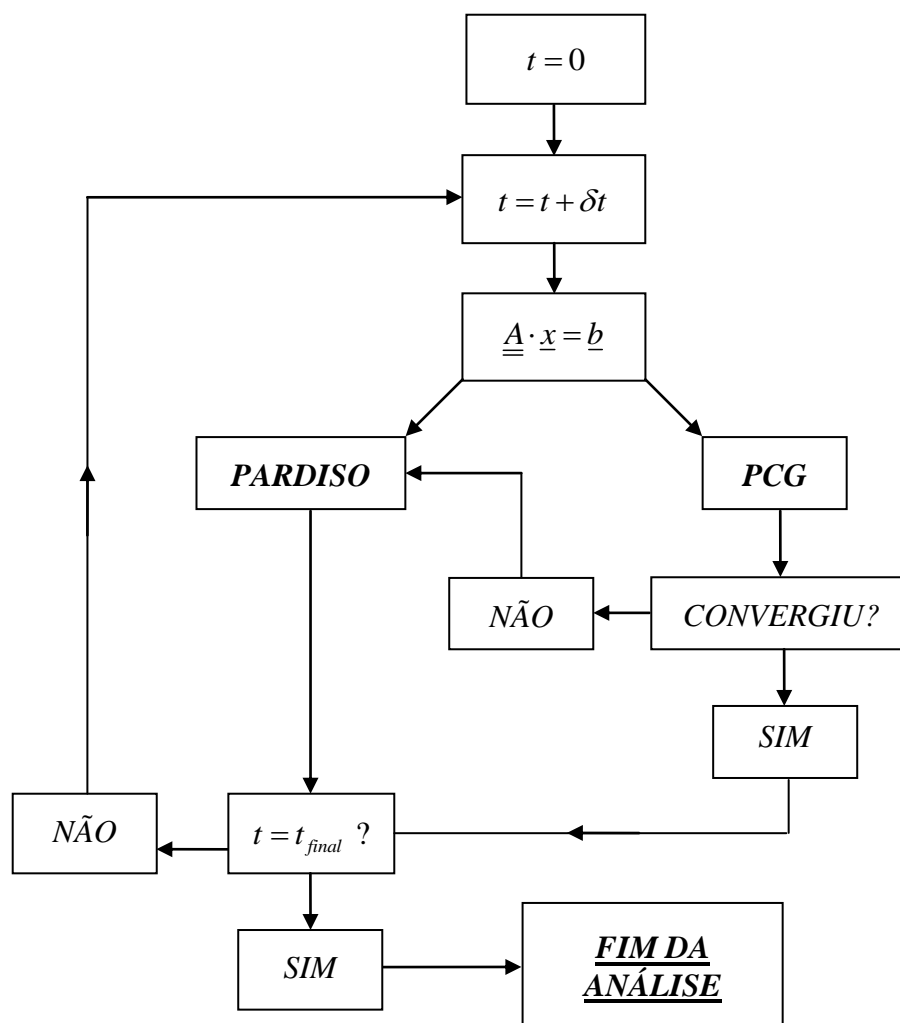


Figura 43: algoritmo de solução do sistema de equações

4.3.3 Integração das deformações plásticas

O algoritmo iterativo implementado neste trabalho para a integração das deformações plásticas é uma generalização do algoritmo descrito por Nguyen (1977) no contexto de um material monofásico sob deformações infinitesimais. A convergência deste algoritmo foi estabelecida por Nguyen (1977) em situações particulares do critério de plasticidade. Seja um corpo em equilíbrio com a força generalizada \underline{F}_n onde todas as grandezas do problema são conhecidas no passo n : os deslocamentos \underline{u}_n , as deformações $\underline{\varepsilon}_n$, as deformações plásticas $\underline{\varepsilon}_n^p$, o estado de tensões $\underline{\sigma}_n$, e o parâmetro de endurecimento $p_{c(n)}$. Aplica-se um incremento de carga $\delta \underline{F}$. O estado de tensões $\underline{\sigma}_{n+1}$ e o parâmetro de endurecimento $p_{c(n+1)}$ estão definidos em (200) e (201), onde H é a função de encruamento que descreve a lei de evolução de p_c :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{n+1} = \underline{\underline{\sigma}}_n + \underline{\underline{C}} : (\delta \underline{\underline{\varepsilon}} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (200)$$

$$p_{c(n+1)} = H(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (201)$$

O incremento de deformação plástica é determinado através do algoritmo descrito a seguir. Primeiro, resolve-se a equação de equilíbrio correspondente ao incremento de carga $\delta \underline{F}$:

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{U} = \delta \underline{F} \quad (202)$$

A partir de \underline{U} calcula-se $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}$

$$\delta \underline{\underline{\varepsilon}} = \left\{ \underline{\underline{\nabla}} \underline{U} \right\}_s \quad (203)$$

Define-se:

$$\underline{\underline{\sigma}}^* = \underline{\underline{\sigma}}_n + \underline{\underline{C}} : \delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (204)$$

Verifica-se então o critério de plasticidade F . Se $F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)}) \leq 0$, então $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p = 0$ e o incremento de deformação correspondente ao incremento de carga aplicado é puramente elástico. Desta forma, tem-se a solução do problema para o passo $n+1$:

$$\underline{u}_{n+1} = \underline{u}_n + \underline{U} \quad (205)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{n+1} = \underline{\underline{\varepsilon}}_n + \delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (206)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{n+1}^p = \underline{\underline{\varepsilon}}_n^p \quad (207)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_{n+1} = \underline{\underline{\sigma}}^* \quad (208)$$

$$p_{c(n+1)} = p_{c(n)} \quad (209)$$

Se $F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)}) > 0$, então $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p \neq 0$, e o incremento de deformação tem componentes elástica e plástica. A regra de fluxo é associada e $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ é calculado como:

$$\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p = \delta \chi \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}}_{n+1}, p_{c(n+1)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (210)$$

A partir de $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ calcula-se as tensões plasticamente admissíveis $\underline{\underline{\sigma}}^{PA}$, e o parâmetro de endurecimento p_c

$$\underline{\underline{\sigma}}^{PA} = \underline{\underline{\sigma}}^* - \underline{\underline{C}} : \delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p \quad (211)$$

$$p_c = H(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (212)$$

de forma a garantir que:

$$F(\underline{\underline{\sigma}}^{PA}, p_c) = 0 \quad (213)$$

O tensor de tensões $\underline{\underline{\sigma}}^{PA}$ é determinado como a projeção de $\underline{\underline{\sigma}}^*$ sobre a superfície de plasticidade atual no sentido do produto escalar definido pela energia elástica.

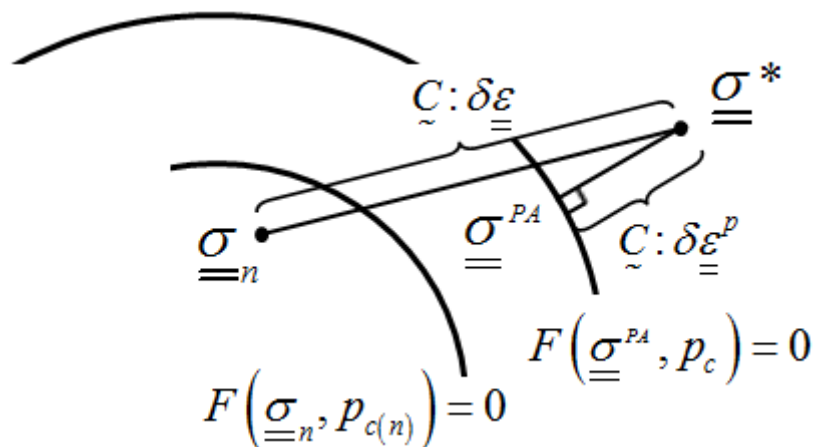


Figura 44: $\underline{\underline{\sigma}}^{PA}$ como projeção de $\underline{\underline{\sigma}}^*$ sobre a superfície de plasticidade (representação geométrica para $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{1}}$)

O problema de evolução elastoplástico consiste em resolver as quatro equações (210)-(213), onde o incremento de deformação plástica $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ deve ser determinado através de um esquema de integração, explícito ou implícito. Neste trabalho adotou-se um esquema explícito de integração, onde os últimos valores conhecidos de $\underline{\underline{\sigma}}^*$ e p_c (neste caso $p_{c(n)}$) são utilizados para determinar a derivada de F . Portanto:

$$\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p = \delta \chi \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (214)$$

A função $F(\underline{\underline{\sigma}}^{PA}, p_c)$ é linearizada a partir de uma aproximação de Taylor de primeira ordem em torno dos últimos valores $\underline{\underline{\sigma}}^*$ e p_c calculados.

$$f(x, y) = f(a, b) + \frac{\partial f(a, b)}{\partial x}(x - a) + \frac{\partial f(a, b)}{\partial y}(y - b) \quad (215)$$

Para $(a = \underline{\underline{\sigma}}^*, b = p_{c(n)})$:

$$\begin{aligned} F(\underline{\underline{\sigma}}^{PA}, p_c) = & F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)}) - \delta \chi \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{C}} : \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \\ & + \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}}^*, p_{c(n)})}{\partial p_c} (p_c - p_{c(n)}) \end{aligned} \quad (216)$$

A função de encruamento $p_c = H(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p)$ é linearizada e substituída na equação (216). Fazendo $F(\underline{\underline{\sigma}}^{PA}, p_c) = 0$, obtém-se uma equação de primeiro grau, com a qual encontra-se o valor de $\delta \chi$. A partir de $\delta \chi$ pode-se determinar $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ utilizando a regra de fluxo explícita. Com $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ determina-se p_c , e também o incremento de força plástica $\delta \underline{\underline{F}}^p = \delta \underline{\underline{F}}^p(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p)$. Resolve-se novamente o sistema de equações com o vetor de forças atualizado:

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\underline{U}} = \delta \underline{\underline{F}} + \delta \underline{\underline{F}}^p \quad (217)$$

A partir de \underline{U} calcula-se novamente $\delta\underline{\varepsilon}$, e as tensões estaticamente admissíveis $\underline{\sigma}^{EA}$:

$$\underline{\sigma}^{EA} = \underline{\sigma}_n + \underline{C} : (\delta\underline{\varepsilon} - \delta\underline{\varepsilon}^p) \quad (218)$$

Verifica-se então se $F(\underline{\sigma}^{EA}, p_c) \leq 0$. Caso isso se cumpra, o incremento de deslocamento \underline{U} , assim como $\delta\underline{\varepsilon}$, $\delta\underline{\varepsilon}^p$, $\underline{\sigma}^{EA}$ e p_c correspondem a solução do passo $n+1$.

$$\underline{u}_{n+1} = \underline{u}_n + \underline{U} \quad (219)$$

$$\underline{\varepsilon}_{n+1} = \underline{\varepsilon}_n + \delta\underline{\varepsilon} \quad (220)$$

$$\underline{\varepsilon}_{n+1}^p = \underline{\varepsilon}_n^p + \delta\underline{\varepsilon}^p \quad (221)$$

$$\underline{\sigma}_{n+1} = \underline{\sigma}^{EA} \quad (222)$$

$$P_{c(n+1)} = P_c \quad (223)$$

Caso $F(\underline{\sigma}^{EA}, p_c) > 0$, calcula-se novamente $\underline{\sigma}^*$, $\delta\underline{\chi}$, $\delta\underline{\varepsilon}^p$, p_c , $\delta\underline{F}^p$, \underline{U} , $\delta\underline{\varepsilon}$, e $\underline{\sigma}^{EA}$, lembrando que para a aproximação de $F(\underline{\sigma}^{PA}, p_c)$ e da derivada de F , utiliza-se sempre os últimos $\underline{\sigma}^*$ e p_c calculados. O processo se repete até que o critério seja satisfeito. O fluxograma da Figura 45 apresenta o algoritmo de integração plástica descrito.

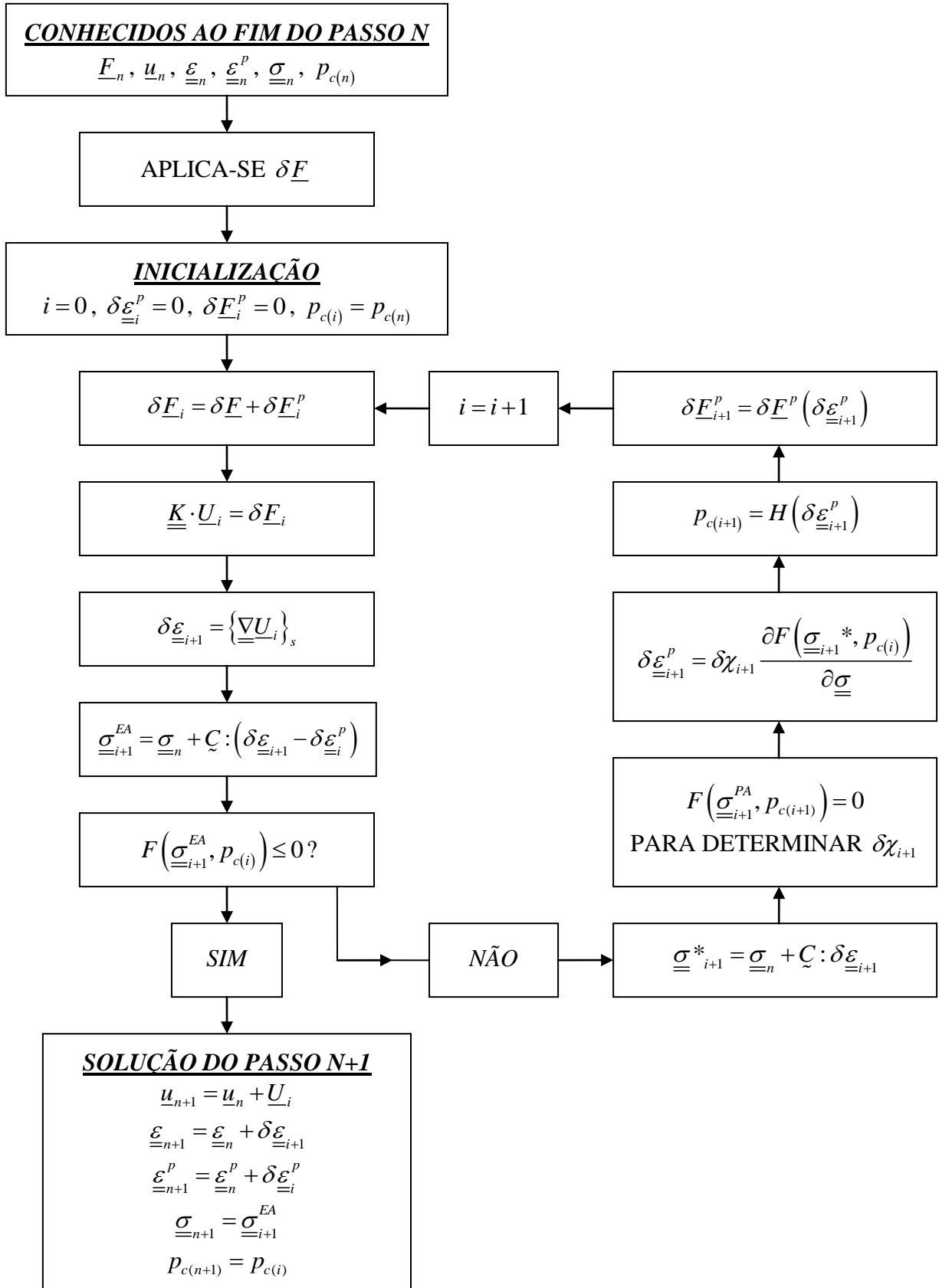


Figura 45: algoritmo de integração das deformações plásticas

Alguns comentários devem ser feitos em relação ao algoritmo de integração das deformações plásticas apresentado. Primeiro, o fluxograma foi apresentado de uma forma genérica. No método dos elementos finitos, o processo de integração das deformações plásticas ocorre nos pontos de gauss dos elementos, e portanto, a solução do problema só é atingida quando o critério for satisfeito em todos os pontos de gauss de todos os elementos da malha.

Segundo, o algoritmo foi apresentado considerando um material elastoplástico em deformações infinitesimais. Para aplicar o algoritmo no modelo constitutivo utilizado neste trabalho, deve-se levar em conta os seguintes aspectos: 1) deve-se resolver os sistemas de equações (197) e (198) para obter os deslocamentos, pressões e temperaturas em $t = t'$; 2) para calcular o estado de tensões ${}^t \underline{\underline{\sigma}}$ em $t = t'$ deve-se acrescentar os termos correspondentes às grandes deformações, às deformações viscoplásticas, aos acoplamentos hidro-mecânico e termomecânico, e também os termos que levam em conta a evolução das propriedades termoporo-mecânicas do material; 3) a lei de encruamento plástica utilizada é a lei logarítmica (58), função da parte irreversível do Jacobiano da transformação; 4) o comportamento do material é controlado pela tensão efetiva de Terzaghi $\underline{\underline{\sigma}}'$, que para o tempo $t = t'$ é calculada como:

$$\begin{aligned} {}^t \underline{\underline{\sigma}}' = & {}^t \underline{\underline{\sigma}}' + {}^t \Delta \underline{\underline{C}} : {}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}'^{ne} + {}^t \underline{\underline{C}} : \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_s - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^p - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} \\ & - {}^t \underline{\underline{\sigma}}' \cdot \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a + \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}' - {}^t \Delta b P \underline{\underline{1}} - {}^t \Delta b' p \underline{\underline{1}} + (1 - {}^t b) P \underline{\underline{1}} \\ & - 3 {}^t \Delta K {}^t \alpha^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^t K {}^t \Delta \alpha^s {}^{0t'} \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^t K {}^t \alpha^s \Theta \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (224)$$

Reescrevendo o critério de Cam-Clay modificado:

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}', p_c) = \frac{3}{2} s : s + M_{cs}^2 p'(p' + p_c) \quad (225)$$

A derivada de f em relação a $\underline{\underline{\sigma}}'$ é:

$$\frac{\partial f^p}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} = 3 s + \frac{1}{3} M_{cs}^2 (2p' + p_c) \underline{\underline{1}} \quad (226)$$

Portanto, o incremento de deformação plástica entre $t = t$ e $t = t'$ fica:

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p = \delta\chi \left[3\underline{\underline{s}} + \frac{1}{3} M_{cs}^2 (2p' + p_c) \underline{\underline{1}} \right] \quad (227)$$

A derivada de f^p em relação a p_c é:

$$\frac{\partial f^p}{\partial p_c} = M_{cs}^2 p' \quad (228)$$

Escrevendo a lei de encruamento para $t = t'$:

$$p_c (J^{ir}) = \frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J_{0r'}^{ir}} \right) \quad (229)$$

A partir de (32) e (108), pode-se decompor a parte irreversível do Jacobiano da transformação entre $t = 0$ e $t = t'$ como:

$$J_{0r'}^{ir} = J_{0r'}^{ir} J_{t'}^{vp} J_{t'}^p \quad (230)$$

Define-se $J_{t'}^p$:

$$J_{t'}^p = 1 + \text{tr} \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p \quad (231)$$

Segundo (227):

$$\text{tr} \underline{\underline{\mathcal{E}}}^p = \delta\chi M_{cs}^2 (2p' + p_c) \quad (232)$$

Substituindo (230), (231) e (232) em (229), tem-se a lei de encruamento para $t = t'$ em função do multiplicador plástico $\delta\chi$:

$$p_c (\delta\chi) = \frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J_{0r'}^p J_{t'}^{vp} \left[1 + \delta\chi M_{cs}^2 (2p' + p_c) \right]} \right) \quad (233)$$

Linearizando a expressão (233) em torno de $\delta\chi = 0$, tem-se:

$$p_c(\delta\chi) = \frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \left[\ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J_{0t}^{ir} J_{tt'}^{vp}} \right) + \delta\chi \frac{(1 - \phi_0) M_{cs}^2 (2p' + p_c)}{J_{0t}^{ir} J_{tt'}^{vp} - (1 - \phi_0)} \right] \quad (234)$$

Observa-se nas equações (233) e (234) que, para um incremento de tempo $\delta t = t' - t$, caso exista incremento de deformação volumétrica viscoplástica no material ($J_{tt'}^{vp} \neq 0$), o parâmetro de encruamento p_c evolui, mesmo que não ocorra incremento de deformação plástica ($\delta\chi = 0$). Isto ocorre devido ao acoplamento entre a plasticidade e viscoplasticidade em (47).

Reescrevendo a linearização do critério de plastificação, lembrando que dentro do processo iterativo utiliza-se sempre os últimos valores calculados de $\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*$ e $p_{c(i)}$ para a aproximação de $f^p(\underline{\underline{\sigma}}^{iPA}, p_c)$ e da derivada de f^p .

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}^{iPA}, p_c) = f^p(\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*, p_{c(i)}) - \delta\chi \frac{\partial f^p(\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*, p_{c(i)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} : \underline{\underline{C}} : \frac{\partial f^p(\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*, p_{c(i)})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} + \frac{\partial f^p(\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*, p_{c(i)})}{\partial p_c} (p_c - p_{c(i)}) \quad (235)$$

Substituindo todos os termos na equação (235), obtém-se finalmente o critério para $t = t'$.

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}^{iPA}, p_c) = f^p(\underline{\underline{\sigma}}_{(i)}^*, p_{c(i)}) - \delta\chi \left[18\mu s_{(i)}^* : s_{(i)}^* + M_{cs}^4 K (2p'_{(i)} + p_{c(i)})^2 \right] + M_{cs}^2 p'_{(i)} \left(\frac{p_{c0}}{\ln \phi_0} \left[\ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J_{0t}^{ir} J_{tt'}^{vp}} \right) + \delta\chi \frac{(1 - \phi_0) M_{cs}^2 (2p' + p_c)}{J_{0t}^{ir} J_{tt'}^{vp} - (1 - \phi_0)} \right] - p_{c(i)} \right) \quad (236)$$

Este algoritmo explícito com critério de plasticidade e lei de encruamento linearizados foi validado com os problemas poroelastoplásticos abordados em Bernaud et al. (2006) e Maghous et al. (2014), nos quais foi utilizado um algoritmo de integração totalmente implícito com a lei de encruamento logarítmica (57). A escolha de se adotar um algoritmo com funções linearizadas é baseada na diminuição do tempo de processamento necessário para a solução dos problemas fortemente não-lineares trabalhados, já que o algoritmo implícito correspondente necessita de métodos numéricos para solução da equação não-linear de $\delta\chi$.

4.3.4 Integração das deformações viscoplásticas

O algoritmo iterativo de integração das deformações viscoplásticas é apresentado no contexto de um material monofásico submetido a deformações infinitesimais. Seja um corpo em equilíbrio no tempo t com a força generalizada ${}^t\underline{F}$ onde todas as grandezas do problema são conhecidas: os deslocamentos ${}^t\underline{u}$, as deformações ${}^t\underline{\varepsilon}$, as deformações viscoplásticas ${}^t\underline{\varepsilon}^{vp}$, o estado de tensões ${}^t\underline{\sigma}$, e o critério estático associado ao limite elástico do material ${}^t p_{vp}^s$, tal que $\Phi(F) \leq 0$. Aplica-se um incremento de carga $\delta\underline{F}$. Para um determinado instante $t' = t + \delta t$, o estado de tensões ${}^{t'}\underline{\sigma}$ e o parâmetro ${}^{t'} p_{vp}^s$ são determinados de acordo com as expressões (237) e (238), onde H é a função que descreve a lei de evolução de p_{vp}^s :

$${}^{t'}\underline{\sigma} = {}^t\underline{\sigma} + \underline{\mathcal{C}} : (\delta\underline{\varepsilon} - \delta\underline{\varepsilon}^{vp}) \quad (237)$$

$${}^{t'} p_{vp}^s = H(\delta\underline{\varepsilon}^{vp}) \quad (238)$$

O incremento de deformação viscoplástica é determinado por meio do algoritmo descrito a seguir. Primeiro, resolve-se a equação de equilíbrio para o incremento de carga $\delta\underline{F}$:

$$\underline{\mathbf{K}} \cdot \underline{\mathbf{U}} = \delta\underline{\mathbf{F}} \quad (239)$$

A partir dos deslocamentos obtidos, determina-se o incremento de deformação $\delta\underline{\varepsilon}$:

$$\delta\underline{\varepsilon} = \left\{ \underline{\nabla} \underline{\mathbf{U}} \right\}_s \quad (240)$$

Calcula-se o estado de tensão associado ao incremento de deformação obtido:

$$\underline{\sigma} = {}^t\underline{\sigma} + \underline{\mathcal{C}} : \delta\underline{\varepsilon} \quad (241)$$

A partir das tensões obtidas, avalia-se a função de escala $\Phi(F)$. Se $\Phi(F) \leq 0$, o incremento de deformação correspondente ao incremento de carga $\delta \underline{F}$ é puramente elástico e tem-se a solução do problema para t' :

$${}^{t'} \underline{u} = {}^t \underline{u} + \underline{U} \quad (242)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\varepsilon}} = {}^t \underline{\underline{\varepsilon}} + \delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (243)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} = {}^t \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \quad (244)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} = {}^t \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{C}} : \delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (245)$$

$${}^{t'} p_{vp}^s = {}^t p_{vp}^s \quad (246)$$

Se $\Phi(F) > 0$, o incremento de deformação tem componentes elástica e viscoplástica. O incremento de deformação viscoplástica entre t e $t' = t + \delta t$ é obtido por meio de um processo iterativo a partir do esquema de integração

$$\delta \underline{\underline{\varepsilon}}_{i+1}^{vp} = \delta t \left[(1-\theta) d_{i+1}^{vp} + \theta d_{i+1}^{vp} \right] \quad (247)$$

onde o índice i representa a i -ésima iteração do algoritmo. Adota-se o esquema explícito de Euler ($\theta = 0$) para a integração das deformações viscoplásticas. Desta forma, a equação (247) é definida em função dos últimos valores obtidos para $\underline{\underline{\sigma}}$ e p_{vp}^s :

$$\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} = \delta t \left[\frac{1}{\eta_{vp}} \langle \Phi(F) \rangle^n \frac{\partial f_d^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right] \quad (248)$$

A partir de $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ determina-se p_{vp}^s segundo (238), e também o incremento de força viscoplástica $\delta \underline{F}^{vp} = \delta \underline{F}^{vp}(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp})$. Resolve-se novamente o sistema de equações com o vetor de forças atualizado.

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\underline{U}} = \delta \underline{\underline{F}} + \delta \underline{\underline{F}}^{vp} \quad (249)$$

Em caso de carga viscoplástica, o estado de tensão está localizado fora do domínio de elasticidade definido por f_s^{vp} . A distância de $\underline{\underline{\sigma}}$ ao último define a magnitude da deformação viscoplástica. Este fato sugere que o critério de convergência para o algoritmo iterativo não pode estar baseado nesta distância. O critério pode ser definido em função do vetor de deslocamentos, do vetor de forças, ou de uma combinação de ambos (BATHE, 1996). Neste trabalho adotou-se um critério de convergência baseado nos deslocamentos. As informações sobre os critérios de convergência adotados no programa poromecânico são apresentadas na seção 4.3.8.

Uma vez resolvido o sistema de equações (249), deve-se recalculer o incremento de deformação $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}$ segundo (240) e verificar a convergência do algoritmo. Se o resultado for positivo, tem-se a solução do problema para $t' = t + \delta t$:

$${}^{t'} \underline{\underline{u}} = {}^t \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{U}} \quad (250)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\varepsilon}} = {}^t \underline{\underline{\varepsilon}} + \delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (251)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} = {}^t \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} + \delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \quad (252)$$

$${}^{t'} \underline{\underline{\sigma}} = {}^t \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{C}} : (\delta \underline{\underline{\varepsilon}} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}) \quad (253)$$

$${}^{t'} p_{vp}^s = H(\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}) \quad (254)$$

Caso o critério de convergência do algoritmo não for atendido, deve-se calcular novamente $\underline{\underline{\sigma}}$, $\delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$, p_{vp}^s e $\delta \underline{\underline{F}}^{vp}$, e resolver novamente o sistema de equações (249). O processo é repetido até que se obtenha a convergência do algoritmo. A Figura 46 apresenta o algoritmo de integração das deformações viscoplásticas.

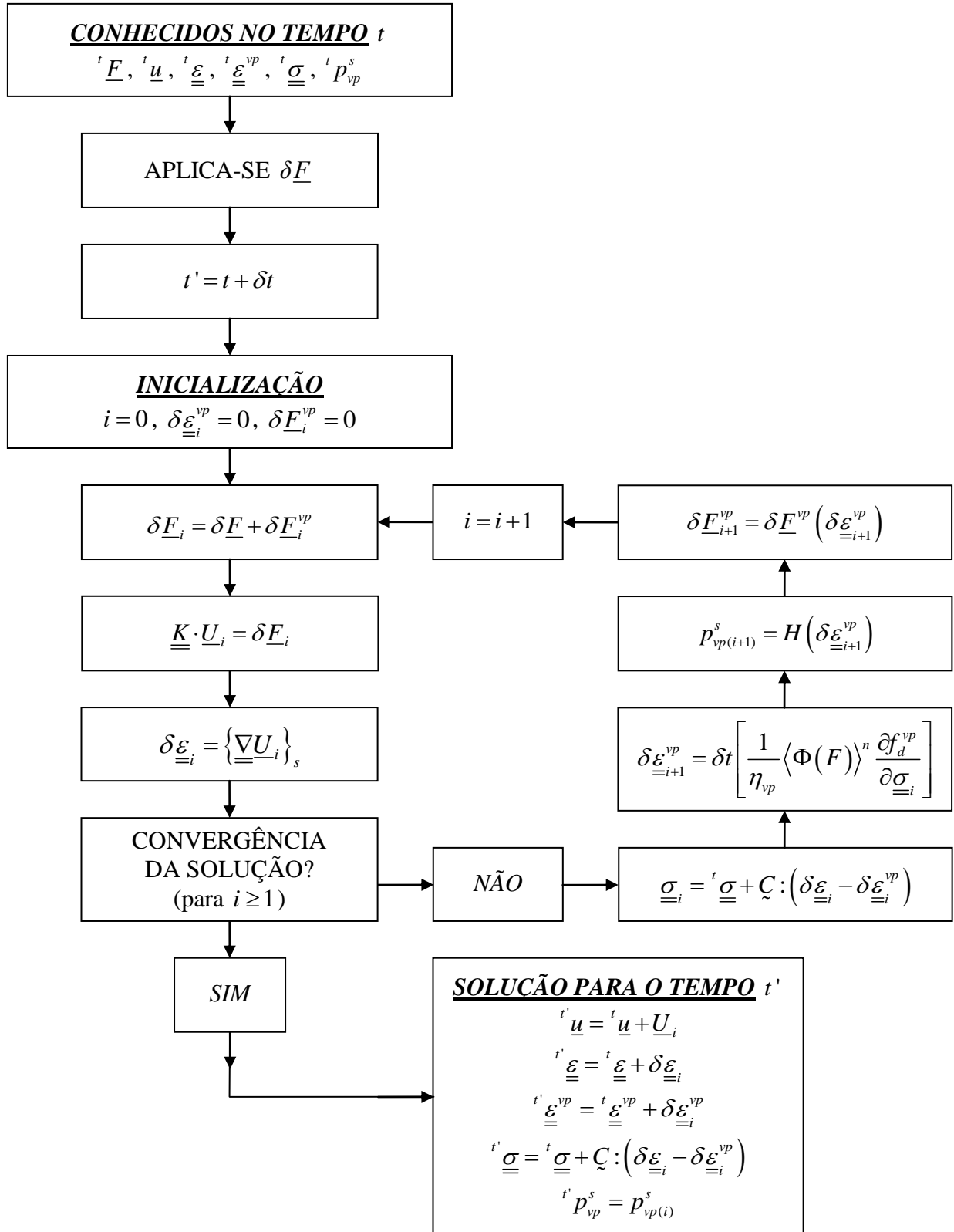


Figura 46: algoritmo de integração das deformações viscoplásticas

Assim como foi feito para plasticidade, o algoritmo de integração das deformações viscoplásticas e o fluxograma da Figura 46 foram apresentados de forma genérica para um material monofásico elasto-viscoplástico submetido a deformações infinitesimais. No modelo poro-elasto-visco-plástico utilizado neste trabalho, a tensão efetiva de Terzaghi $\underline{\underline{\sigma}}'$ é calculada para o tempo t' a partir da equação (255), a superfície dinâmica f_d^{vp} que representa o estado de tensão efetiva ao qual o material está submetido tem a forma (256), que igualada a zero resulta na equação (257) para a pressão de consolidação viscoplástica p_{vp}^d . A função de escala $\Phi(F)$ utilizada para determinar se o material sofre deformações viscoplásticas é dada pela expressão (258), a taxa de deformação viscoplástica $\underline{\underline{d}}^{vp}$ é dada pela lei de fluxo (259) e a lei de evolução adotada para p_{vp}^s é a lei logarítmica (260).

$$\begin{aligned} {}^t \underline{\underline{\sigma}}' = & {}^t \underline{\underline{\sigma}}' + {}^t \Delta \underline{\underline{C}} : {}^t \underline{\underline{C}}^{-1} : {}^t \underline{\underline{\sigma}}^{ne} + {}^t \underline{\underline{C}} : \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_s - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^p - {}^t \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} \\ & - {}^t \underline{\underline{\sigma}}' \cdot \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a + \left\{ {}^t \underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{U}}) \right\}_a \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}' - {}^t \Delta b P \underline{\underline{1}} - {}^t \Delta b' p \underline{\underline{1}} + (1 - {}^t b) P \underline{\underline{1}} \\ & - 3 {}^t \Delta K' \alpha^s \text{ } 0t' \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^t K' \Delta \alpha^s \text{ } 0t' \Delta T \underline{\underline{1}} - 3 {}^t K' \alpha^s \Theta \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (255)$$

$$f_d^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}', p_{vp}^d) = \frac{3}{2} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}} + M_{vp}^2 p' (p' + p_{vp}^d) = 0 \quad (256)$$

$$p_{vp}^d = -\frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}}}{M_{vp}^2 p'} - p' \quad (257)$$

$$\Phi(F) = F - 1 = \frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \quad (258)$$

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \frac{1}{\eta_{vp}} \langle \Phi(F) \rangle^n \frac{\partial f_d^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} \quad (259)$$

$$p_{vp}^s(J^{ir}) = p_{vp0}^s \left(\frac{\ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J^{ir}} \right)}{\ln \phi_0} \right)^m \quad (260)$$

A derivada de f_d^{vp} em relação a $\underline{\underline{\sigma}}'$ fica:

$$\frac{\partial f_d^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}'} = 3\underline{\underline{s}} + \frac{1}{3} M_{vp}^2 (2p' + p_{vp}^d) \underline{\underline{1}} \quad (261)$$

Portanto, para um material submetido a um estado de tensão sob o qual $\Phi(F) > 0$, o incremento de deformação viscoplástica entre t e $t' = t + \delta t$ fica da seguinte forma:

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} = \delta t \left[\frac{1}{\eta_{vp}} \left(\frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \right)^n \left(3\underline{\underline{s}} + \frac{1}{3} M_{vp}^2 (2p' + p_{vp}^d) \underline{\underline{1}} \right) \right] \quad (262)$$

A parte irreversível do Jacobiano da transformação entre $t = 0$ e $t = t'$ é definida como:

$$J_{0t'}^{ir} = J_{0t'}^{ir} J_{t't'}^p J_{t't'}^{vp} \quad (263)$$

Define-se $J_{t't'}^{vp}$:

$$J_{t't'}^{vp} = 1 + \text{tr} \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} \quad (264)$$

Obtém-se o traço do incremento de deformação viscoplástica a partir de (262):

$$\text{tr} \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} = \delta t \left[\frac{1}{\eta_{vp}} \left(\frac{p_{vp}^d}{p_{vp}^s} - 1 \right)^n M_{vp}^2 (2p' + p_{vp}^d) \right] \quad (265)$$

Por último, o critério estático fica definido pela expressão (266) em função do incremento das deformações volumétricas irreversíveis plásticas e viscoplásticas sofridas pelo material durante o intervalo de tempo $\delta t = t' - t$.

$$p_{vp}^s (J^{ir}) = p_{vp0}^s \left(\frac{\ln \left(1 - \frac{1 - \phi_0}{J_{0t'}^{ir} J_{t't'}^p (1 + \text{tr} \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp})} \right)}{\ln \phi_0} \right)^m \quad (266)$$

4.3.5 Integração simultânea das deformações plásticas e viscoplásticas

Baseado nos algoritmos de integração das deformações plásticas e viscoplásticas apresentados em 4.3.3 e 4.3.4, o fluxograma da Figura 47 ilustra o algoritmo computacional desenvolvido para o caso em que as deformações plásticas e viscoplásticas ocorrem simultaneamente.

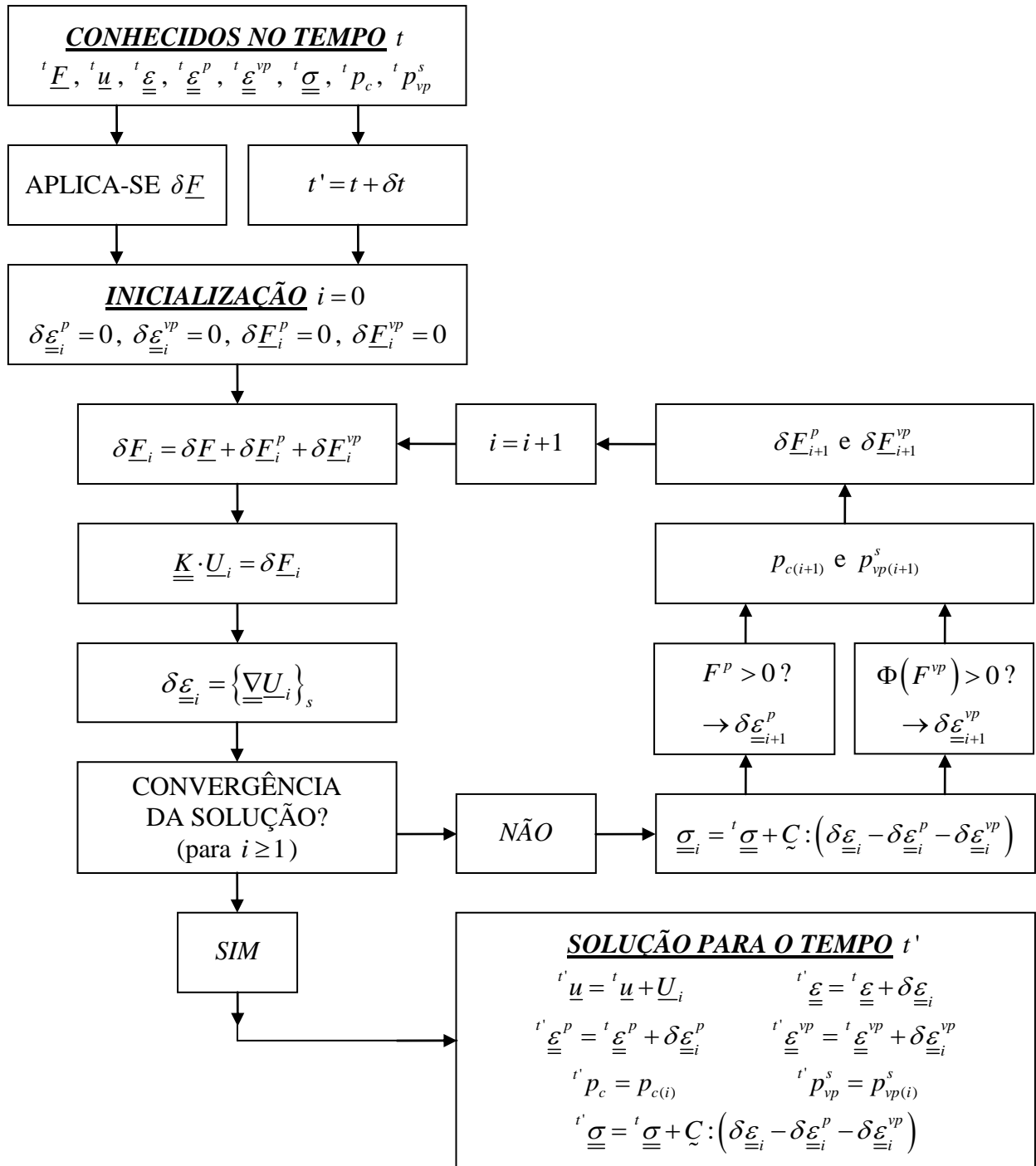


Figura 47: algoritmo de integração simultânea das deformações plásticas e viscoplásticas

4.3.6 Aplicação à simulação de uma bacia sedimentar

Uma especificidade da simulação numérica de bacias sedimentares reside no fato de se tratar de um sistema aberto, pois durante a fase de deposição ou erosão da bacia há troca de matéria entre o sistema e sua vizinhança. Na realidade, o fluxo de massa fluida que pode ocorrer no contorno $\partial\Omega_f$ do domínio geométrico Ω_f , também caracteriza um sistema aberto. No entanto, isso é abordado no problema através da equação do balanço de massa fluida, e nenhum artifício adicional é necessário para a realização dos procedimentos numéricos. A especificidade aqui abordada diz respeito ao acréscimo ou remoção dos sedimentos da bacia.

Uma forma de simular estes processos no contexto do método dos elementos finitos é acrescentando/removendo elementos da malha conforme o material é depositado/erodido. A idéia é bastante simples, mas a modificação do número de nós e de elementos da malha requer alguns cuidados especiais, principalmente no que diz respeito à estrutura de dados do programa e à manipulação da memória do computador.

Uma abordagem alternativa é a utilização do método de ativação/desativação de elementos. Trata-se de um método inicialmente desenvolvido para simular os processos de escavação e colocação de revestimento em túneis (HANAFY; EMERY, 1980; Bernaud et al. 1995). Neste método, o sistema aberto é simulado como um sistema fechado fictício, onde a malha inicial permanece inalterada, e a entrada e saída de materiais do sistema são realizadas através de mudanças nas propriedades dos elementos. Este é o método utilizado neste trabalho. O algoritmo é baseado em Bernaud et al. (2006) e expandido para o domínio tridimensional no contexto da termoporomecânica.

Para que a evolução temporal deste sistema fechado fictício corresponda à evolução do sistema aberto real, alguns cuidados devem ser tomados referentes à discretização temporal e espacial do processo de deposição e erosão dos sedimentos, e também à escolha de propriedades adequadas para simular os elementos não-ativados (pré-deposicionais) e desativados (erodidos) da malha. Deve-se também garantir que os elementos não-ativados, assim como os desativados, representem adequadamente o comportamento da água do mar. Considere a representação esquemática do processo de deposição dos sedimentos da bacia apresentada na Figura 48. A base da bacia está localizada em $z=0$ e o nível do mar corresponde à cota $z=L_0$. A

cota referente ao topo da camada de sedimentos é definida pela equação $z = H(t)$, onde $H(t)$ refere-se à espessura total da bacia no tempo t .

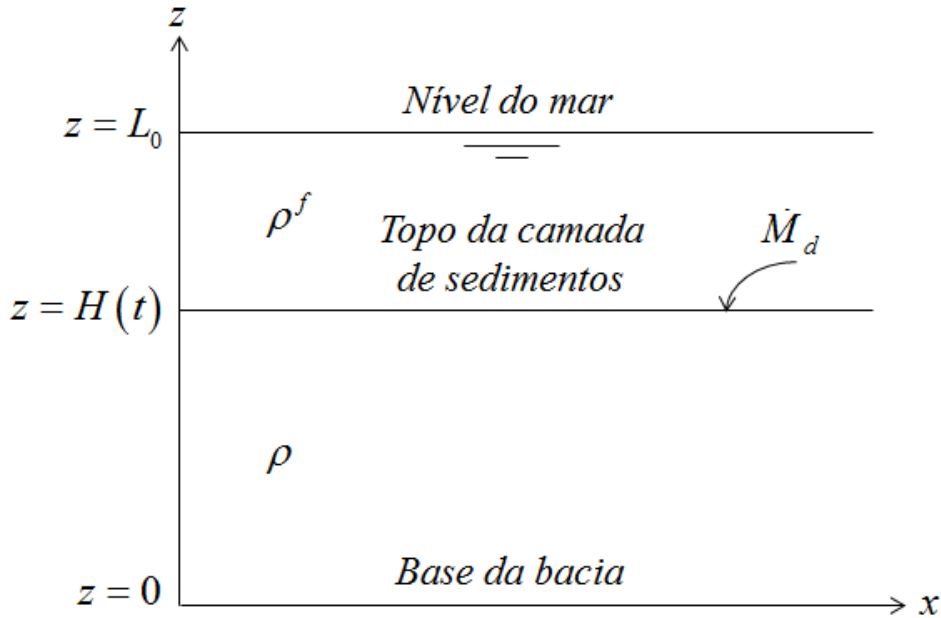


Figura 48: representação esquemática do processo de deposição dos sedimentos

Considera-se que a massa específica da bacia é função apenas da sua coordenada vertical z e do tempo t , $\rho(x, y, z, t) = \rho(z, t)$. Desta forma, a massa de sedimentos fornecidos por unidade de área a partir do momento inicial $t = 0$ é igual a massa da coluna vertical com seção transversal unitária da equação (267):

$$M_d(t) = \int_0^{H(t)} \rho(z, t) dz \quad (267)$$

A partir deste raciocínio, pode-se definir a altura H de uma camada de sedimentos depositada entre os tempos $t = 0$ e $t = T$ utilizando a equação (268), onde $\rho_0(t)$ é a massa específica inicial do material depositado no instante de tempo t .

$$H = \int_0^T \frac{\dot{M}_d(t)}{\rho_0(t)} dt \quad (268)$$

Na realidade, H representa a espessura da camada que foi depositada na bacia até o tempo T caso o material depositado fosse rígido. No entanto, enquanto uma camada de sedimentos é aplicada, as camadas já depositadas encontram-se em processo de compactação.

O tempo correspondente ao período de sedimentação é subdividido em n subintervalos $[t_{i-1}, t_i]$ com $t_0 = 0$ e $t_n = T$. O número de camadas utilizadas na discretização espacial de H é o mesmo número de subintervalos de tempo que foram utilizados para a discretização temporal do período de sedimentação T da bacia. Desta forma, a cada incremento de tempo $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$, o acréscimo de material depositado na bacia corresponde a uma altura ΔH_i . Este processo começa no fundo da bacia em $z = 0$ e avança até a cota $z = H(t)$ correspondente a altura da camada de sedimentos, levando em consideração a compactação ocorrida nas camadas subjacentes.

$$\Delta H_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{\dot{M}_d(t)}{\rho_0(t)} dt \quad (269)$$

Antes de serem ativados, os elementos finitos que constituem a malha do problema considerado devem representar corretamente os efeitos da água do mar sobre a bacia. Para a solução do problema poromecânico, o estado inicial de tensão e pressão destes elementos, assim como a sua massa específica e coeficiente de permeabilidade devem ser escolhidos adequadamente. Para um elemento localizado a uma altura $z = H_i$, tem-se:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\rho^f g (L_0 - H_i) \underline{\underline{1}} \quad p = \rho^f g (L_0 - H_i) \quad (270)$$

Para a permeabilidade deve-se atribuir um valor que seja elevado em relação a permeabilidade inicial k_0^f dos sedimentos que serão depositados $|k^f| \gg k_0^f$. Este valor permite que se mantenha a distribuição hidrostática de pressões definida em (270). Para a massa específica do elemento atribui-se a massa específica da água ρ^f . Desta forma, o equilíbrio global das camadas não-ativadas faz com que o vetor tensão atuante sobre o topo da camada de sedimentos $z = H(t)$ (onde $H(t) < H_i$) seja exatamente $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{e}}_z = -\rho^f g (L_0 - H(t)) \underline{\underline{e}}_z$, que corresponde a carga de coluna d'água sobre a bacia. Além disso, os vetores de força resultante sobre os nós das camadas não ativadas é zero. Portanto, conforme as camadas depositadas deformam, as

camadas sobrejacentes que representam a água do mar são submetidas a deslocamentos de corpo rígido. As demais propriedades poromecânicas não têm nenhuma influência no comportamento dos elementos não-ativados.

No caso do problema de condução térmica, onde o topo da camada de sedimentos é submetido a uma temperatura prescrita correspondente a temperatura do fundo do oceano, deve-se adotar um coeficiente de condutividade térmica elevado nos elementos não-ativados em relação ao valor inicial dos elementos que serão depositados $|k^t| \gg k_0^t$. Desta forma, garante-se que as condições de contorno de temperatura prescrita no topo da malha de elementos finitos sejam reproduzidas no topo da bacia, isto é, na face superior dos elementos já depositados, que corresponde a cota $z = H(t)$.

O fluxograma da Figura 49 apresenta o algoritmo de ativação para o processo de deposição dos sedimentos descrito, com um período de sedimentação definido entre $t_0 = 0$ e $t_n = T$ subdividido em n intervalos. A malha é dividida em n camadas. A análise vai de $t = 0$ até $t = t_{final}$ ($t_{final} > T$) com incrementos de tempo δt (geralmente $\delta t \ll \Delta t_i$). A idéia é mostrar como o algoritmo de ativação dos elementos pode ser implementado em um algoritmo de elementos finitos existente.

Alguns comentários devem ser feitos a respeito do algoritmo de deposição sedimentar apresentado. Primeiro, é importante ressaltar que Δt_i e ΔH_i não são necessariamente constantes. Caso haja uma variação importante na taxa de deposição dos sedimentos ao longo do tempo, ou mesmo se for desejável uma melhor discretização da malha em determinadas profundidades da bacia, as camadas que compõe a malha de elementos finitos podem ter diferentes valores de ΔH_i , assim como diferentes intervalos de tempo Δt_i necessários para sua ativação.

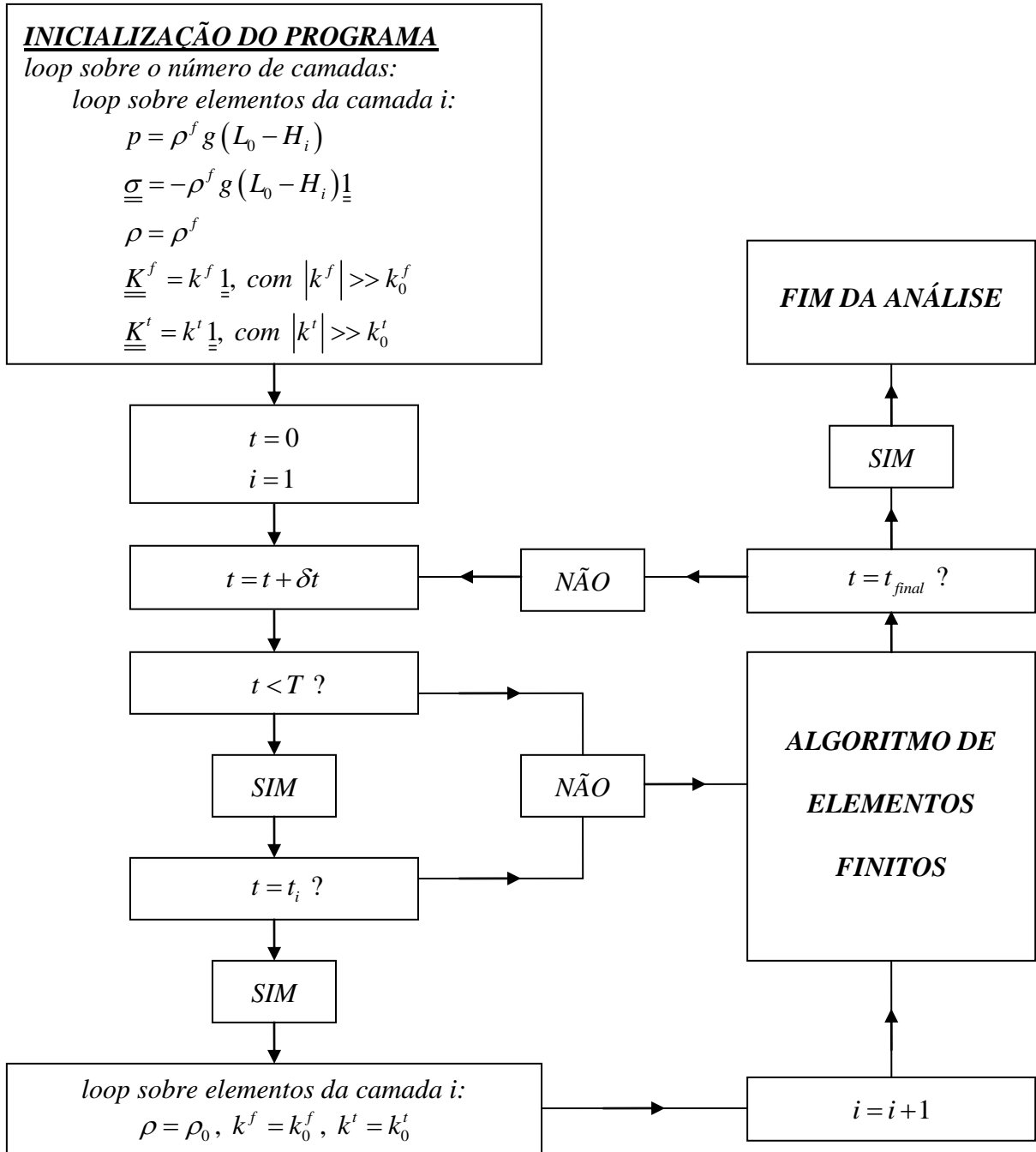


Figura 49: algoritmo de ativação para o processo de deposição dos sedimentos

Segundo, as camadas depositadas não precisam necessariamente ser homogêneas ao longo do plano horizontal XY . Pode-se ter uma distribuição de massa específica inicial heterogênea $\rho_0 = \rho_0(x, y, t)$, assim como das demais propriedades termopromecânicas do material sedimentar. Caso a taxa de deposição sedimentar por unidade de área também seja variável ao longo destas direções, $\dot{M}_d = \dot{M}_d(x, y, t)$, basta tomar os devidos cuidados na discretização

temporal da formação das camadas, e também na geração da malha, já que no método de ativação/desativação dos elementos a estrutura de dados da malha inicial permanece inalterada.

Terceiro, foi apresentado apenas o detalhamento do algoritmo referente ao processo de deposição sedimentar. No entanto, para simular períodos de erosão sedimentar o raciocínio é exatamente o mesmo: ao desativar um elemento, seu estado de tensão e pressão passa a ser hidrostático, e deve-se aplicar uma permeabilidade elevada ao elemento, assim como a massa específica da água para o problema poromecânico, e um coeficiente de condutividade térmica elevado para simular apropriadamente o problema de condução de calor da bacia.

Quarto, a fase de deposição sedimentar não precisa começar necessariamente em $t = 0$. Esta fase pode ser simulada em qualquer momento da história da bacia. O mesmo vale para a erosão. Portanto, em uma única análise, pode-se alternar fases deposicionais, não deposicionais, e também fases erosionais, de acordo com a história da bacia modelada. No entanto, processos intermediários de deposição/erosão são mais complicados de implementar com o método proposto, quando a malha está deformada.

4.3.7 Fluxograma do módulo térmico

A Figura 50 apresenta o fluxograma geral do módulo térmico. O passo de tempo utilizado é baseado no tempo característico de difusão térmica através da expressão (271), onde α é a difusividade térmica do material e h o tamanho do elemento na direção do problema (Lewis et al. 2004).

$$\Delta t_{ref}^t = \frac{h^2}{\alpha} \quad (271)$$

$$\alpha = \frac{k^t}{\rho c} \quad (272)$$

Como as propriedades do material evoluem com o tempo em função da variação de temperatura, o passo de tempo de referência inicial $\Delta t_{ref,0}^t$ pode mudar drasticamente ao longo da análise realizada. Para lidar com esta situação desenvolveu-se um algoritmo de passo de tempo

automático, onde antes de realizar o incremento de tempo $t = t + \delta t$, realiza-se uma busca em todos os elementos para avaliar a equação (271). Adota-se então o passo de tempo

$$\delta t = \beta^t \delta t_{\min}^t \quad (273)$$

onde δt_{\min}^t é o menor valor obtido para a expressão (271) na busca realizada sobre todos elementos da malha, e β^t é um escalar da ordem da unidade que deve ser adotado pelo usuário.

$$\delta t_{\min}^t = \min(\Delta t_{ref}^t) \quad (274)$$

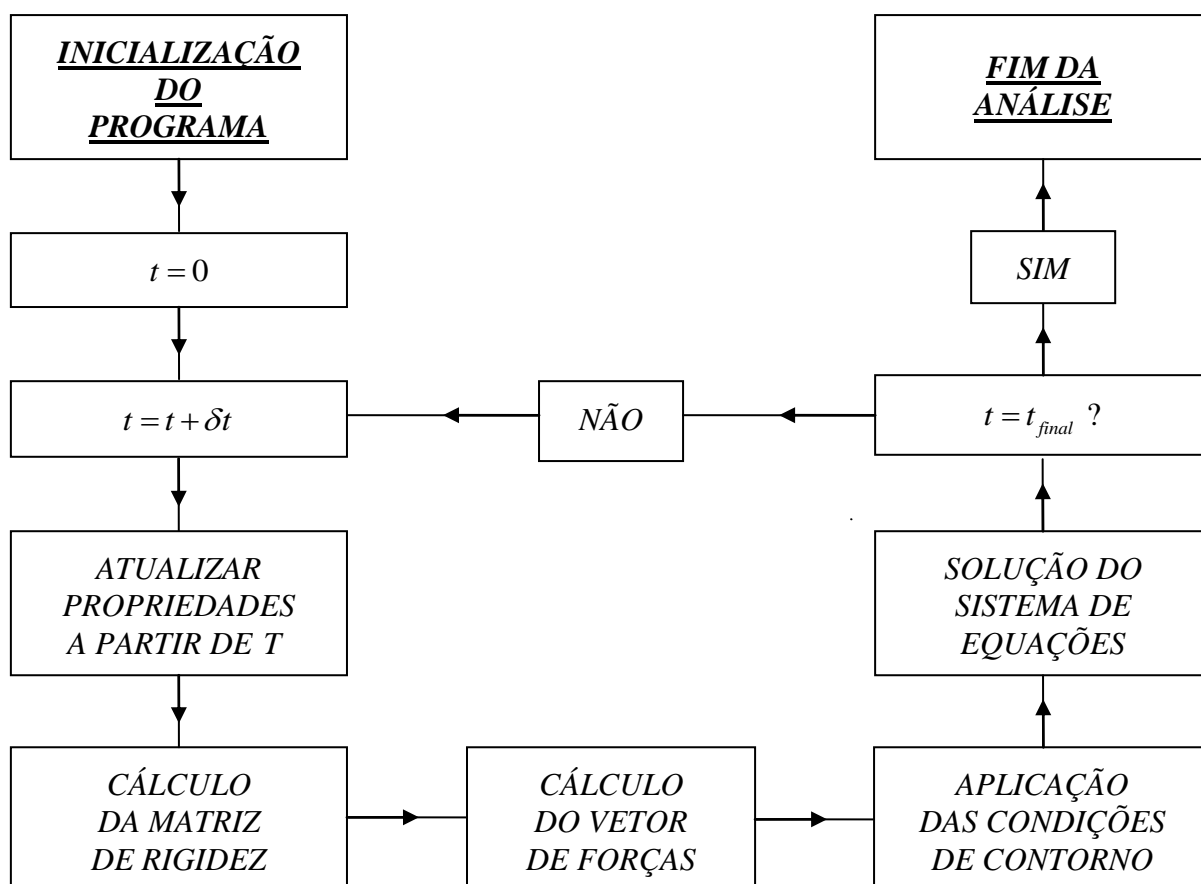


Figura 50: fluxograma do módulo térmico

4.3.8 Fluxograma do módulo poromecânico

A Figura 51 apresenta o fluxograma geral do módulo poromecânico. O passo de tempo adotado é baseado no tempo característico de difusão da massa fluida através da expressão (275), onde c_m é o coeficiente de difusividade líquida do material poroso e h o tamanho do elemento na direção do problema (Bernaude et al. 2002).

$$\Delta t_{ref}^f = \frac{h^2}{c_m} \quad (275)$$

$$c_m = \frac{k^f ME_{oed}}{E_{oed} + Mb^2} \quad (276)$$

O módulo de elasticidade oedométrico E_{oed} é definido como:

$$E_{oed} = K + \frac{4}{3}\mu \quad (277)$$

No entanto, o algoritmo explícito adotado para integração das deformações viscoplásticas é condicionalmente estável e, portanto, deve-se respeitar um passo de tempo mínimo associado ao tempo característico de relaxação do material, definido como (SIMO; HUGHES, 1998):

$$\Delta t_{ref}^{vp} = \frac{\eta_{vp}}{E_{oed}} \quad (278)$$

Como as propriedades do material evoluem com o tempo em função da sua porosidade, os passos de tempo de referência iniciais $\Delta t_{ref,0}^f$ e $\Delta t_{ref,0}^{vp}$ podem variar significativamente ao longo da análise. Adotou-se um algoritmo de passo de tempo automático, onde antes de realizar o incremento de tempo $t = t + \delta t$, realiza-se uma busca em todos os elementos para avaliar as expressões (275) e (278). Adota-se então o passo de tempo

$$\delta t = \text{mín}(\beta^f \delta t_{mín}^f, \beta^{vp} \delta t_{mín}^{vp}) \quad (279)$$

onde δt_{\min}^f e δt_{\min}^{vp} são, respectivamente, os menores valores obtidos para as expressões (275) e (278) na busca realizada sobre todos elementos da malha, e β^f e β^{vp} são escalares da ordem da unidade que devem ser adotados pelo usuário.

$$\delta t_{\min}^f = \text{mín}(\Delta t_{ref}^f) \quad (280)$$

$$\delta t_{\min}^{vp} = \text{mín}(\Delta t_{ref}^{vp}) \quad (281)$$

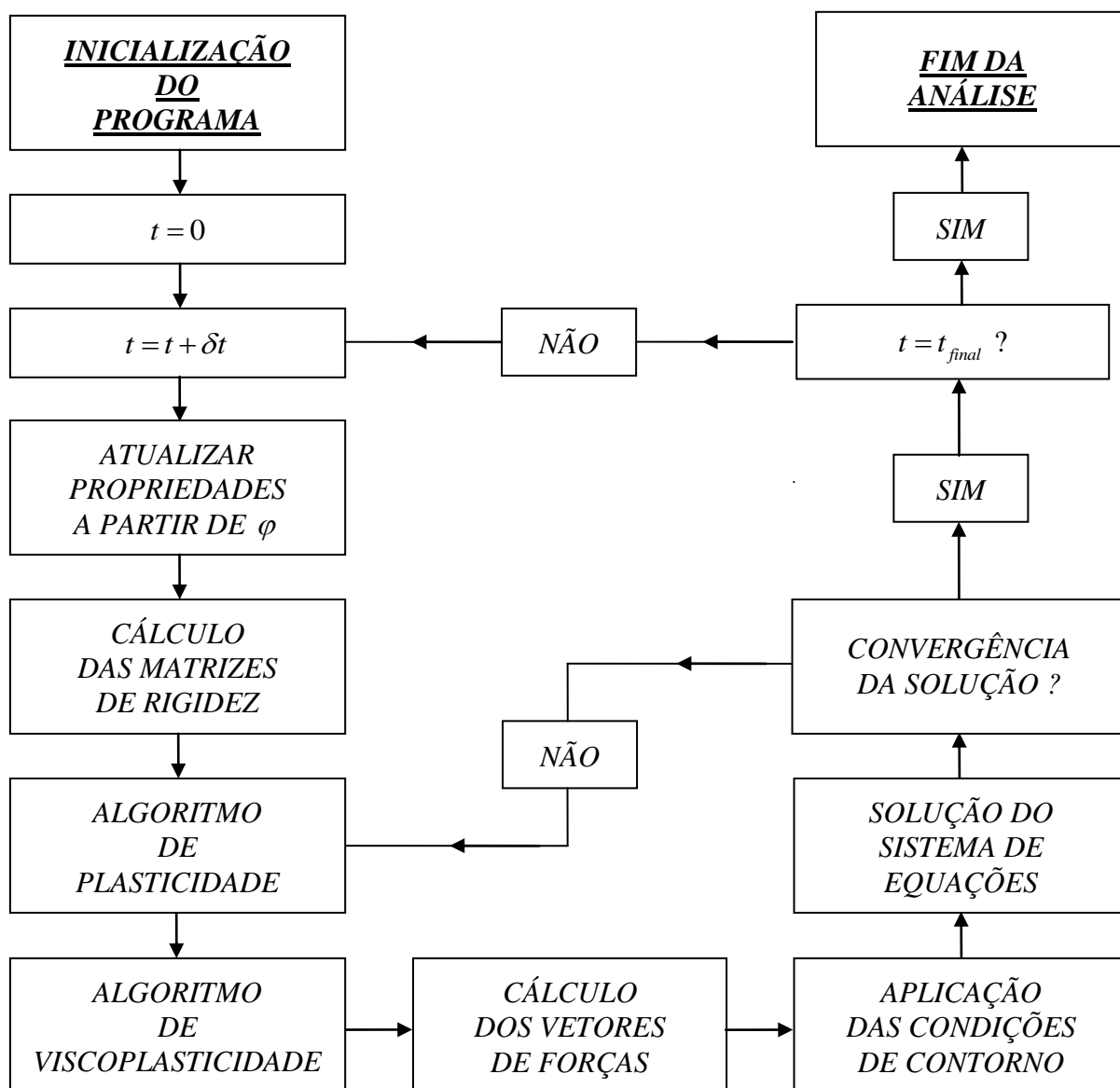


Figura 51: fluxograma do módulo poromecânico

A convergência do algoritmo não-linear é função dos vetores deslocamento $\underline{\mathcal{U}}$ e variação de pressão $\underline{\mathcal{P}}$, separadamente. Para um passo de tempo t , a convergência dos deslocamentos é verificada através da razão entre a norma do vetor $\Delta\underline{\mathcal{U}} = \underline{\mathcal{U}}_i - \underline{\mathcal{U}}_{i-1}$ e a norma do vetor $\underline{\mathcal{U}}_0$, onde $\underline{\mathcal{U}}_i$ é o vetor deslocamento obtido na i -ésima iteração do processo não linear, $\underline{\mathcal{U}}_{i-1}$ é a solução da iteração anterior, e $\underline{\mathcal{U}}_0$ é a primeira solução obtida para o passo de tempo t .

$$\frac{|\Delta\underline{\mathcal{U}}|}{|\underline{\mathcal{U}}_0|} \leq TOL \quad (282)$$

De forma equivalente, tem-se para o vetor variação de pressão:

$$\frac{|\Delta\underline{\mathcal{P}}|}{|\underline{\mathcal{P}}_0|} \leq TOL \quad (283)$$

Ressalta-se que a tolerância adotada para a solução dos deslocamentos e pressões não precisa ser necessariamente a mesma. Uma vez que ambas as equações (282) e (283) são satisfeitas, obtém-se a convergência do algoritmo para o tempo t .

4.3.9 Fluxograma geral do programa termoporomecânico

O fluxograma geral do programa termoporomecânico está apresentado na Figura 52. O programa incorpora o algoritmo de ativação dos elementos, o módulo térmico e o módulo poromecânico. Algumas observações devem ser feitas em relação à incorporação e funcionamento unificado de todas estas ferramentas.

Primeiro, pode-se ativar ou desativar cada um dos três módulos do programa (deposição, térmico, poromecânico) de acordo com a simulação desejada. Por exemplo, é possível simular o processo de formação de uma bacia sedimentar através do algoritmo de ativação/desativação dos elementos, juntamente com uma análise da sua evolução térmica, sem levar em conta as deformações associadas ao seu comportamento poromecânico. Ou então, pode-se optar por resolver um simples problema de consolidação isotérmica de uma camada de sedimentos poroelástica em deformações infinitesimais.

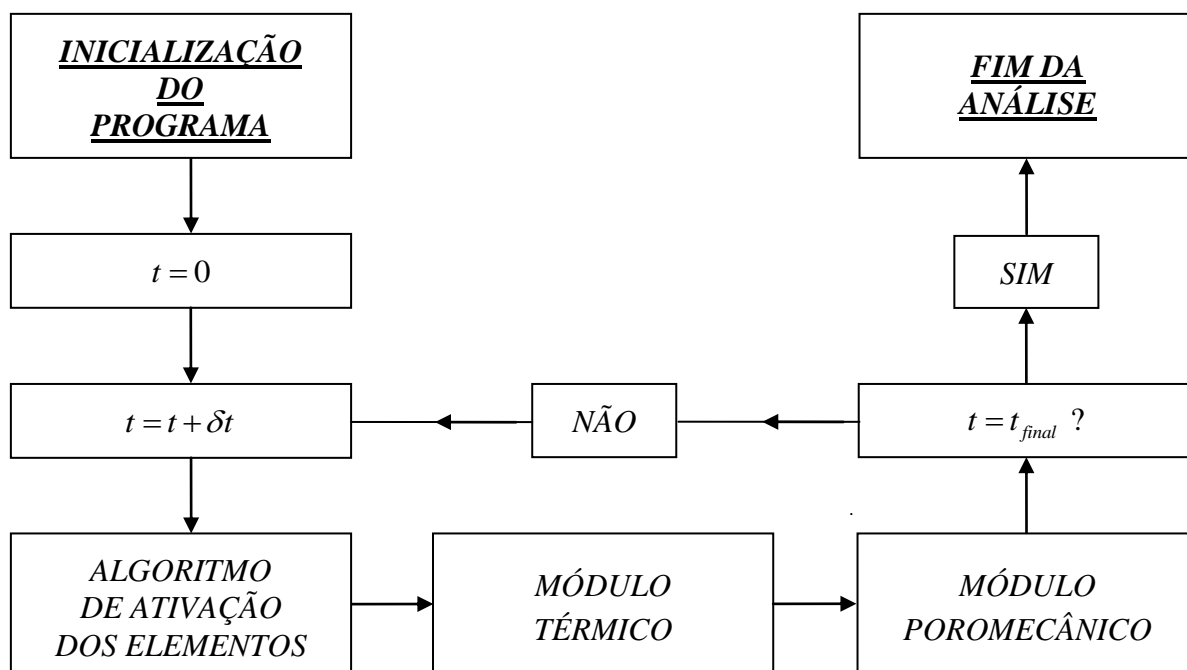


Figura 52: fluxograma geral do programa termoporomecânico

Segundo, embora o algoritmo do módulo térmico tenha sido apresentado na Figura 50 com as propriedades variando apenas em função da temperatura, e o algoritmo do módulo poromecânico apresentado na Figura 51 com as propriedades variando apenas em função da porosidade, no programa acoplado termoporomecânico todas as propriedades térmicas e poromecânicas do material podem variar em função da temperatura e porosidade simultaneamente. Por exemplo, a permeabilidade do material evolui de acordo com a evolução da porosidade e da viscosidade da água, que é função da temperatura, como mostram as equações (103) e (104).

Terceiro, como pode haver diferença significativa entre o tempo característico de difusão térmica e o tempo característico de difusão da massa fluida e, portanto, uma diferença significativa entre os passos de tempo δt necessários para a simulação dos problemas térmico e poromecânico, o programa incorporado termoporomecânico permite trabalhar com diferentes passos de tempo para cada módulo. Para otimizar o tempo de processamento global e sincronizar os instantes de tempo em que ocorre a troca de informações entre os módulos térmico e poromecânico, adotou-se um algoritmo que redefine o passo de tempo do problema térmico δt_T obtido segundo a equação (273) em função do passo de tempo do problema poromecânico δt_{UP} fornecido pela expressão (279) a partir do número inteiro N .

$$N = \text{int} \left(\frac{\delta t_{UP}}{\delta t_T} \right) + 1 \quad (284)$$

O passo de tempo do módulo térmico δt_T é então redefinido como:

$$\delta t_T = \frac{\delta t_{UP}}{N} \quad (285)$$

A Figura 53 apresenta o esquema de discretização temporal adotado. Conhecidos todos os campos termoporomecânicos no instante t , o programa repete sucessivamente as etapas 1 a 4 até o fim da análise: 1) o módulo térmico resolve o sistema de equações (197) N vezes com passo de tempo δt_T obtido da equação (285) até o instante $t' = t + \delta t_{UP}$; 2) o módulo térmico passa informações para o módulo poromecânico; 3) o módulo poromecânico resolve o sistema de equações (198) entre t e t' com passo de tempo δt_{UP} ; 4) o módulo poromecânico passa informações para o módulo térmico. Observa-se que quando $\delta t_T > \delta t_{UP}$, a equação (284) resulta em $N = 1$ e, portanto, a expressão (285) fornece $\delta t_T = \delta t_{UP}$.

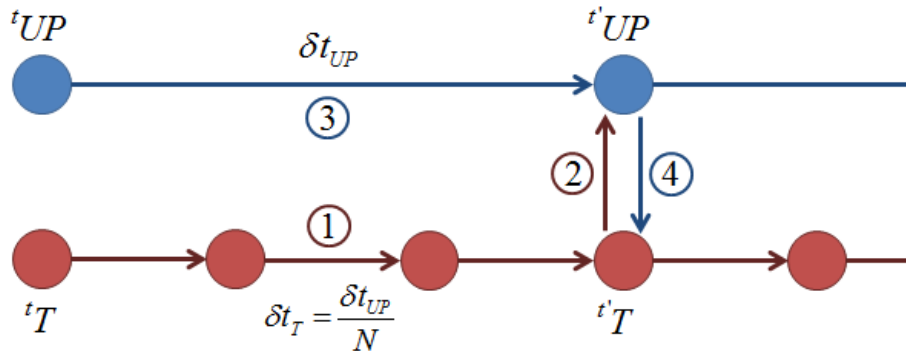


Figura 53: discretização temporal do programa termoporomecânico

Como consequência da evolução das propriedades termoporomecânicas do material em função da temperatura e porosidade, os valores dos passos de tempo de referência apresentados nas expressões (271), (275) e (278) também evoluem, modificando os passos de tempo adotados para o módulo térmico δt_T e poromecânico δt_{UP} , dados pelas expressões (273) e (279). Desta forma, o número N obtido da equação (284) é modificado sistematicamente em função da evolução das propriedades da estrutura, alterando automaticamente a configuração do esquema de discretização temporal apresentado na Figura 53.

4.4 VALIDAÇÃO DA FERRAMENTA COMPUTACIONAL

A validação da ferramenta computacional e dos módulos térmico e poromecânico é realizada por meio de comparações das soluções numéricas com soluções analíticas.

4.4.1 Módulo térmico

Considere um elemento 1D de comprimento H com uma temperatura inicial homogênea não nula $T(t_0) = T_0$. Em $t = t_0^+$ aplica-se uma condição de fluxo nulo $q = q^{t,d} = 0$ na sua extremidade inferior $z = 0$, e uma temperatura prescrita nula $T = T^d = 0$ na sua extremidade superior $z = H$. A solução do problema transiente de condução térmica é dada pela equação

$$T(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos(\lambda z) e^{-\lambda^2 \alpha t} \quad (286)$$

$$A_n = \frac{2T_0 (-1)^n}{\lambda H} \quad \lambda = \frac{(2n+1)\pi}{2H} \quad (287)$$

onde α é a difusividade térmica definida em (272). O material que constitui o problema é homogêneo com propriedades constantes. Os parâmetros que definem o problema são: $H = 1000$ m, $T_0 = 10^\circ\text{C}$, $\rho = 2400$ kg/m³, $c = 1000$ J/kg°C, $k^t = 2$ W/m°C. O tempo característico do problema de condução térmica pode ser estimado como:

$$T_{carac} = \frac{H^2}{\alpha} \quad (288)$$

O valor obtido para este problema é $T_{carac} = 1.2 \times 10^{12}$ s = 38052 anos. A discretização espacial é realizada por meio de uma coluna composta por 20 elementos regularmente distribuídos com altura $h = 50$ m. A equação (271) fornece $\Delta t_{ref}^t = 3 \times 10^9$ s ≈ 95 anos. O passo de tempo adotado é fixo, $\delta t = 95$ anos. Os resultados obtidos para diferentes instantes da análise estão apresentados na Figura 54, onde as linhas contínuas representam a solução analítica (286), e

os marcadores representam os valores obtidos na solução numérica. Observa-se que foi necessário um tempo $t \approx 2T_{carac}$ para atingir o estado estacionário do problema.

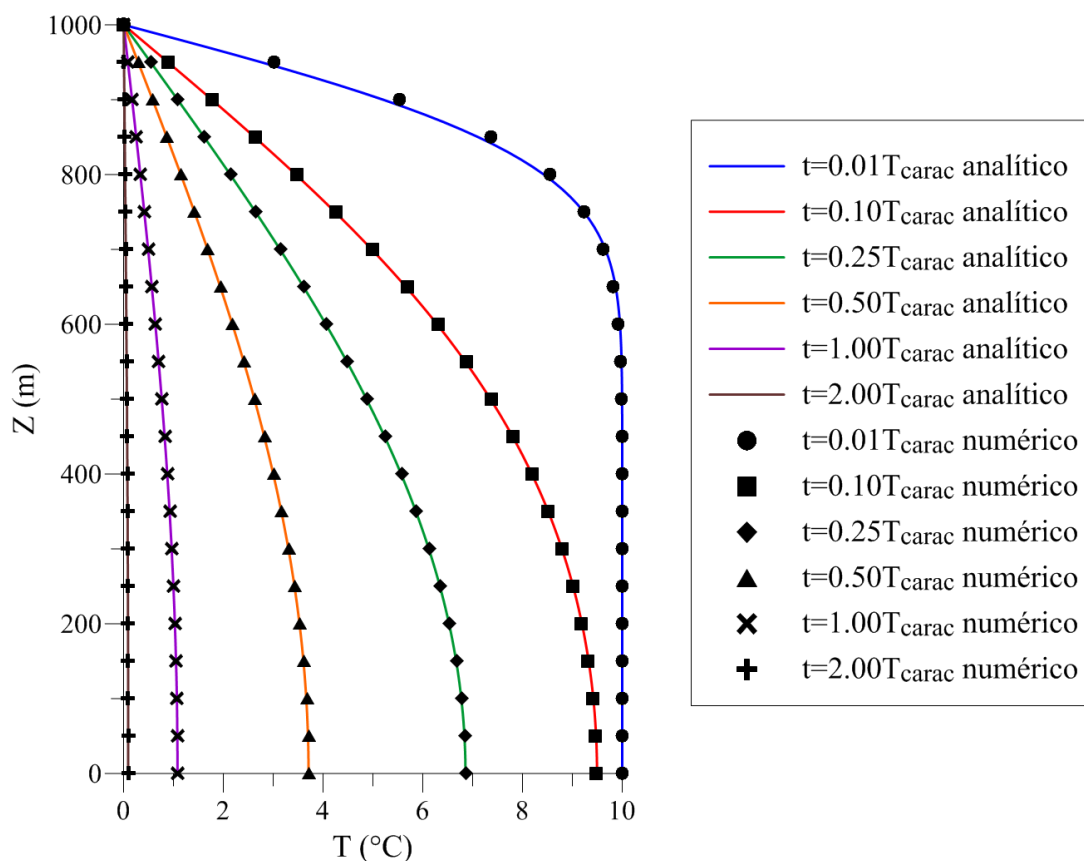


Figura 54: validação do módulo térmico

É importante salientar que as condições de contorno do problema apresentado para validação do módulo térmico não correspondem às condições de contorno de uma bacia sedimentar. No problema proposto foi aplicada uma condição de isolamento térmico (fluxo nulo) na extremidade inferior do elemento estudado. No caso de uma bacia sedimentar, aplica-se uma condição de contorno de fluxo térmico ascendente em sua base, que corresponde ao calor produzido nas camadas mais internas da Terra e conduzido até a bacia. No entanto, o problema apresentado, que foi escolhido devido à simplicidade de obtenção da sua solução analítica, é considerado suficiente para validar a ferramenta numérica do módulo térmico. A ordem de grandeza dos valores adotados para H , ρ , c e k^t proporcionam uma estimativa para o tempo característico de um problema de condução térmica em uma bacia sedimentar.

4.4.2 Módulo poromecânico

A validação do módulo poromecânico é baseada no problema inicialmente introduzido em (MAGHOUS, 2009). Considere o volume elementar representativo do material sedimentar apresentado na Figura 55. Na sua configuração inicial, o *VER* é um domínio paralelepipedico Ω_0 de altura h_0 e lados l_0 . O *VER* refere-se à partícula macroscópica do material sedimentar que está em processo de compactação durante a deposição das camadas subjacentes que formam a bacia. O carregamento é definido por uma deformação axial prescrita paralela a direção vertical \underline{e}_3 , isto é, compressão oedométrica. Em referência a Figura 55, $\delta > 0$ representa a magnitude do deslocamento vertical aplicado para baixo na face superior do *VER*.

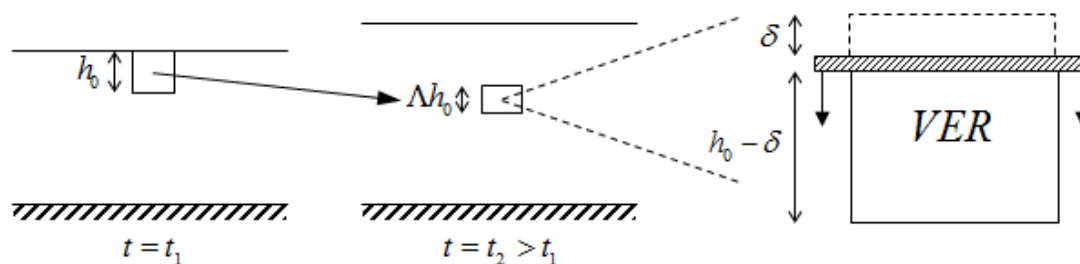


Figura 55: modelo simplificado de compactação: geometria e carregamento

De certa forma, o valor do deslocamento δ imposto ao *VER* está conectado com a profundidade da partícula na bacia sedimentar e a quantidade $\Lambda = 1 - \delta / h_0$ pode ser interpretada como o alongamento vertical imposto a esta partícula. Em outras palavras, supõe-se que a resposta do *VER* a valores crescentes de δ representa as tensões e deformações das partículas localizadas em profundidades crescentes na bacia.

O problema é abordado em condições drenadas (sem excesso de poro-pressão). Assume-se que o material do *VER* é homogêneo com propriedades elásticas, plásticas e viscoplásticas isotrópicas. Ademais, os efeitos das grandes deformações volumétricas plásticas sobre estas propriedades, como o aumento da rigidez e do módulo de endurecimento do material, são desconsiderados. Em particular, os coeficientes de Lamé λ e μ são considerados constantes.

Para facilitar o desenvolvimento de uma solução analítica que sirva de referência para validação da ferramenta numérica, o modelo constitutivo deste exemplo baseia-se em modelos plástico e viscoplástico simplificados. O critério de plasticidade f^p é definido como

$$f^p(\underline{\underline{\sigma}}, p_c) = -\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} - p_c \quad (289)$$

onde o parâmetro p_c é idêntico a pressão de consolidação no modelo Cam-Clay (CHARLEZ, 1997). O módulo de endurecimento $m = -dp_c/dJ^p$ é considerado constante, isto é, p_c evolui linearmente em função das deformações volumétricas plásticas:

$$p_c(J^p) = m(1 - J^p) + p_{c0} \quad (290)$$

onde p_{c0} é a pressão de consolidação inicial. A regra de fluxo plástico associada é dada por

$$\underline{\underline{d}}^p = \dot{\chi} \frac{\partial f^p}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = -\frac{\dot{\chi}}{3} \underline{\underline{1}} \quad (291)$$

com $\dot{\chi} \geq 0$. Para o comportamento viscoplástico, o qual representa os efeitos do fenômeno de pressão-solução na escala macroscópica, utiliza-se um critério simplificado similar ao que foi adotado para a plasticidade:

$$f^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}, p_{vp}) = -\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} - p_{vp} \quad (292)$$

O parâmetro viscoplástico p_{vp} é considerado constante e satisfaz a condição (293) para assegurar que o material sedimentar sofre apenas deformações plásticas para valores moderados de δ , isto é, para as camadas superiores da bacia sedimentar.

$$P_{vp} > P_{c0} \quad (293)$$

A taxa de deformação viscoplástica é dada por

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \frac{3}{\eta} \left\langle \frac{f^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}, p_{vp})}{f_0} \right\rangle \frac{\partial f^{vp}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = \frac{1}{\eta f_0} \left(\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} + p_{vp} \right) \underline{\underline{1}} \quad (294)$$

onde f_0 é uma medida adimensional de uma tensão de referência, e η o coeficiente de viscosidade, considerado constante.

A partir de $\delta(t=0)=0$, o processo de carregamento imposto ao *VER* consiste em prescrever a função continuamente crescente $t \rightarrow \delta(t)$ com $\dot{\delta}(t) > 0$. O estado inicial de tensão é natural, $\underline{\underline{\sigma}}(t=0)=0$. A resposta mecânica do *VER* é determinada em qualquer fase do nível de compactação δ/h_0 . Em condições oedométricas, a taxa de deformação é homogênea no *VER*:

$$\underline{\underline{d}} = d \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \quad (295)$$

$$d = \frac{\dot{\Lambda}}{\Lambda} = -\frac{\dot{\delta}/h_0}{1-\delta/h_0} \quad (296)$$

O Jacobiano da transformação que caracteriza a mudança de volume do *VER* é dado por $J = \Lambda = 1 - \delta/h_0$. A equação constitutiva em forma de taxa fica:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = 2\mu \left(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir} \right) + \lambda \operatorname{tr} \left(\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{ir} \right) \underline{\underline{1}} \quad (297)$$

4.4.2.1 Regime elástico infinitesimal: $0 \leq \delta \leq \delta^e$ ($0 \leq t \leq t^e$)

Como as deformações elásticas são consideradas infinitesimais, esta fase corresponde a um pequeno intervalo de carregamento $\delta \leq \delta^e \ll h_0$. Do ponto de vista de engenharia, esta fase de compactação puramente elástica prevaleceria ao longo de uma crosta superficial que dificilmente afeta a deformação total da bacia. No domínio elástico tem-se $\underline{\underline{d}}^{ir} = 0$, o que leva a seguinte distribuição de tensões:

$$\underline{\underline{\sigma}}(\delta) = \sigma \left[\lambda (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) + (\lambda + 2\mu) \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \right] \quad (298)$$

$$\sigma = \ln(1 - \delta/h_0) \approx -\frac{\delta}{h_0} \quad (299)$$

De acordo com (293), o critério de plasticidade (289) implica que o *VER* sofre deformações puramente elásticas enquanto

$$\delta \leq \delta(t^e) = \delta^e = h_0 \left(1 - \exp \frac{-P_{c0}}{K} \right) \approx h_0 \frac{P_{c0}}{K} \quad (300)$$

onde $K = \lambda + 2\mu/3$ é o módulo de compressão do material. Esta fase termina em $t = t^e$ com a correspondente distribuição de tensão:

$$\underline{\underline{\sigma}}(\delta^e) = \underline{\underline{\sigma}}^e = -\frac{P_{c0}}{K} \left[\lambda (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) + (\lambda + 2\mu) \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \right] \quad (301)$$

4.4.2.2 Regime elásto-plástico: $\delta^e \leq \delta \leq \delta^p$ ($t^e \leq t \leq t^p$)

Esta fase começa em $t = t^e$ com a ativação da plasticidade. Nesta etapa, a taxa de deformação irreversível corresponde a taxa de deformação plástica $\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^p$ definida em (291). O multiplicador plástico $\dot{\chi}$ é obtido a partir da condição $\dot{f}^p = 0$ juntamente com as expressões (289)-(291) e (297):

$$\dot{\chi} = \frac{\dot{\delta}/h_0}{(1 - \delta/h_0)(1 + mJ^p/K)} \quad (302)$$

Substituindo (302) na relação $\dot{J}^p = J^p \text{tr} \underline{\underline{d}}^p = -J^p \dot{\chi}$ leva a seguinte equação diferencial que governa a evolução de J^p :

$$\frac{\dot{J}^p}{J^p} + \frac{m}{K} \dot{J}^p + \frac{\dot{\delta}/h_0}{1 - \delta/h_0} = 0 \quad (303)$$

A solução de (303) é:

$$J^p(\delta) = \frac{K}{m} \text{W} \left(\frac{m}{K} (1 - \delta/h_0) \exp \frac{m + P_{c0}}{K} \right) \quad (304)$$

onde $x \rightarrow W(x)$ é a função LambertW definida por $W(x) \exp W(x) = x$. Esta função satisfaz $W(x \exp x) = x$. O campo de tensão é obtido da integração da relação constitutiva (297)

$$\underline{\underline{\sigma}}(\delta) = \underline{\underline{\sigma}}^e + m (J^p - 1) \underline{\underline{1}} + 2\mu \left(\ln(1 - \delta/h_0) + \frac{P_{c0}}{K} \right) \left[\underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 - \frac{1}{3} \underline{\underline{1}} \right] \quad (305)$$

com $J^p = J^p(\delta)$ dado por (304). Esta fase elastoplástica permanece enquanto a condição $f^p(\underline{\underline{\sigma}}, p_c) \leq f^{vp}(\underline{\underline{\sigma}}, p_{vp})$, ou equivalentemente $p_c = m(1 - J^p) + p_{c0} \leq p_{vp}$ seja satisfeita. Esta condição em combinação com (304) conduz a:

$$\delta \leq \delta(t^p) = \delta^p \quad (306)$$

$$\delta^p/h_0 = 1 - \left(1 - \frac{P_{vp} - P_{c0}}{m} \right) \exp \frac{-P_{vp}}{K} \quad (307)$$

No tempo $t = t^p$, tem-se que $p_c(\delta^p) = p_{vp}$. O Jacobiano da transformação plástica e o estado de tensões ficam:

$$J^p(t^p) = J^p(\delta^p) = 1 - \frac{P_{vp} - P_{c0}}{m} \quad (308)$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}(t^p) &= \underline{\underline{\sigma}}(\delta^p) = \underline{\underline{\sigma}}^e - (p_{vp} - p_{c0}) \underline{\underline{1}} \\ &+ 2\mu \left(\ln \left(1 - \frac{P_{vp} - P_{c0}}{m} \right) - \frac{P_{vp} - P_{c0}}{K} \right) \left[\underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 - \frac{1}{3} \underline{\underline{1}} \right] \end{aligned} \quad (309)$$

4.4.2.3 Regime elásto-plástico-viscoplástico: $\delta^p \leq \delta \leq \delta^{vp}$ ($t^p \leq t \leq t^{vp}$)

Se o carregamento continua além de δ^p , o VER sofre deformações viscoplásticas, que representam a ativação do fenômeno de pressão-solução (IPS) na bacia sedimentar. A taxa de deformação irreversível tem componentes plástica e viscoplástica:

$$\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp} = -\frac{\dot{\chi}}{3} \underline{\underline{1}} + \frac{1}{\eta f_0} \left(\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} + p_{vp} \right) \underline{\underline{1}} \quad (310)$$

A plasticidade impõe as condições $f^p = \dot{f}^p = 0$:

$$\text{tr} \underline{\underline{\sigma}}/3 = -p_c \quad (311)$$

$$\text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}}/3 = -\dot{p}_c = m \dot{J}^p = m J^p \text{tr} \underline{\underline{d}}^p = -m J^p \dot{\chi} \quad (312)$$

A equação constitutiva (297) fornece:

$$\text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}}/3 = K \left(-\frac{\dot{\delta}/h_0}{1-\delta/h_0} + \dot{\chi} - \frac{3}{\eta f_0} (\text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}}/3 + p_{vp}) \right) \quad (313)$$

Combinando (312) e (313):

$$\dot{\chi} = \frac{1}{1+m J^p/K} \left(\frac{\dot{\delta}/h_0}{1-\delta/h_0} - \frac{3}{\eta f_0} (p_c - p_{vp}) \right) \quad (314)$$

Como a fase elasto-plástica-viscoplástica inicia quando $p_c = p_c(t^p) = p_{vp}$, a expressão (314) indica que a regra de fluxo plástico $\dot{\chi} \geq 0$ é satisfeita para $t = t^p$. Consequentemente, contanto que a taxa de compactação $\dot{\delta}/h_0$ permaneça positiva, haverá sempre um intervalo $t^p \leq t \leq t^{vp}$ para o qual $\dot{\chi} \geq 0$. Durante este intervalo a quantidade $t \rightarrow p_c(t) - p_{vp}$ é uma função crescente.

Substituindo a lei de endurecimento (290) e a identidade $\dot{\chi} = -\text{tr} \underline{\underline{d}}^p = -\dot{J}^p/J^p$ em (314) leva a seguinte equação diferencial que governa a evolução de J^p :

$$\frac{\dot{J}^p}{J^p} + \frac{m}{K} \dot{J}^p + \frac{3m}{\eta f_0} J^p - \frac{3}{\eta f_0} (p_{c0} + m - p_{vp}) + \frac{\dot{\delta}/h_0}{1-\delta/h_0} = 0 \quad (315)$$

Exceto para situações particulares, não é possível encontrar soluções fechadas para esta equação diferencial, e soluções numéricas se fazem necessárias. Uma abordagem alternativa con-

siste na integração direta de (315) entre o tempo t^p (início do regime elasto-plástico-viscoplástico) e o tempo t :

$$\begin{aligned} \frac{3m}{\eta f_0} \int_{t^p}^t J^p(\tau) d\tau &= \frac{3}{\eta f_0} (p_{c0} + m - p_{vp})(t - t^p) \\ + \ln \frac{1 - \delta(t)/h_0}{1 - \delta(t^p)/h_0} - \ln \frac{J^p(t)}{J^p(t^p)} - \frac{m}{K} (J^p(t) - J^p(t^p)) \end{aligned} \quad (316)$$

Onde $\delta(t^p) = \delta^p$ e $J^p(t^p)$ são fornecidos, respectivamente, pelas equações (307) e (308). O interesse na equação (316) é que ela proporciona uma forma simples para calcular numericamente $t \rightarrow J^p(t)$. Isto pode ser feito, por exemplo, discretizando o intervalo temporal $[t^p, t]$ e avaliando numericamente o termo integral da equação (316). Utilizando a regra trapezoidal de integração numérica em conjunto com um incremento de tempo constante $\Delta t = t_i - t_{i-1}$, com $t_0 = t^p$, chega-se na solução:

$$J^p(t_i) = \frac{1}{\frac{m}{K} + \frac{3m}{2\eta f_0} \Delta t} \mathbb{W} \left(\left[\frac{m}{K} + \frac{3m}{2\eta f_0} \Delta t \right] \exp F_i \right) \quad (317)$$

$$\begin{aligned} F_i &= \frac{3(p_{c0} + m - p_{vp})}{\eta f_0} i \Delta t + \ln \frac{1 - \delta(t_i)/h_0}{1 - \delta(t_0)/h_0} + \ln J^p(t_0) \\ &+ \left(\frac{m}{K} - \frac{3m}{2\eta f_0} \Delta t \right) J^p(t_0) - \frac{3m}{\eta f_0} \Delta t \sum_{k=1}^{i-1} J^p(t_k) \end{aligned} \quad (318)$$

Uma vez que o Jacobiano plástico $J^p(t)$ é determinado, a pressão de consolidação $p_c(t)$ pode ser avaliada por meio da lei de endurecimento (290), e o multiplicador plástico $\dot{\chi}$ pode ser calculado de (314). As componentes da taxa de deformação irreversível $\underline{\underline{d}}^{ir}$ são obtidas:

$$\underline{\underline{d}}^p = -\frac{\dot{\chi}}{3} \underline{\underline{1}} \quad (319)$$

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = \frac{1}{\eta f_0} \left(\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} + p_{vp} \right) \underline{\underline{1}} = \frac{1}{\eta f_0} (-p_c + p_{vp}) \underline{\underline{1}} \quad (320)$$

A partir da relação constitutiva (297), chega-se na equação para o estado de tensão:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}(t) = & \underline{\underline{\sigma}}(t^p) + m \left(J^p(t) - J^p(t^p) \right) \underline{\underline{1}} \\ & + 2\mu \ln \frac{1 - \delta(t)/h_0}{1 - \delta(t^p)/h_0} \left[\underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 - \frac{1}{3} \underline{\underline{1}} \right] \end{aligned} \quad (321)$$

Esta fase, caracterizada pela coexistência de taxas de deformação plástica e viscoplástica se mantém enquanto o multiplicador plástico se mantém positivo $\dot{\chi} \geq 0$. Portanto, esta fase termina no tempo $t = t^{vp}$ definido como $\dot{\chi}(t^{vp}) = 0$:

$$p_c(t^{vp}) = p_{vp} + \frac{\eta f_0}{3} \frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0} \quad (322)$$

Uma vez que o carregamento do VER $t \rightarrow \delta(t)$ é prescrito, e lembrando que $p_c(t)$ é calculado a partir do procedimento recém descrito, a equação (322) teoricamente pode ser resolvida em relação a variável t^{vp} .

No tempo $t = t^{vp}$, o VER muda do regime elasto-plástico-viscoplástico $\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^p + \underline{\underline{d}}^{vp}$ para o regime elasto-viscoplástico $\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^{vp}$. As equações (290) e (322) resultam em

$$J^p(t^{vp}) = J^p(\delta^{vp}) = 1 - \frac{p_{vp} - p_{c0}}{m} - \frac{\eta f_0}{3m} \frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0} \quad (323)$$

onde $\delta^{vp} = \delta(t^{vp})$. A comparação de (308) e (323) mostra que $J^p(t^{vp}) - J^p(t^p) \leq 0$. No entanto, deve-se verificar se a condição $J^p(t^{vp}) > 0$ permanece satisfeita para os dados considerados no problema. Caso contrário, a solução obtida não é mais válida. O campo de tensão neste instante é:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}(t^{vp}) = \underline{\underline{\sigma}}(\delta^{vp}) = \underline{\underline{\sigma}}(t^p) - \frac{\eta f_0}{3} \frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0} \underline{\underline{1}} \\ + 2\mu \ln \frac{1 - \delta(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^p)/h_0} \left[\underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 - \frac{1}{3} \underline{\underline{1}} \right] \end{aligned} \quad (324)$$

4.4.2.4 Regime elásto-viscoplástico: $\delta^{vp} \leq \delta$ ($t^{vp} \leq t$)

Contanto que $J^p(t^{vp}) > 0$, esta situação vai acontecer se o processo de carregamento definido por $\delta(t)$ é levado além de δ^{vp} . Nesta situação, o VER sofre taxas de deformação irreversível puramente viscoplástica, isto é, $\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^{vp}$. Isto significa que nenhuma deformação plástica adicional se desenvolve no VER, $\underline{\underline{d}}^p(t) = 0$ para $t > t^{vp}$. Esta condição indica que $\forall t \geq t^{vp} \dot{J}^p(t) = 0$, que por sua vez implica que $\forall t \geq t^{vp} \dot{p}_c(t) = 0$. Resulta da equação do critério de plasticidade (289) que:

$$\dot{f}^p = -\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} - \dot{p}_c = -\frac{1}{3} \text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} \quad (325)$$

Uma descarga plástica $\dot{f}^p < 0$ implicaria que $\text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} > 0$, o que é irrelevante na perspectiva da modelagem de bacias. Admite-se, portanto, que nenhum processo de descarga ocorre durante esta fase. Sendo assim, $\dot{f}^p = 0$ e, portanto, $\forall t \geq t^{vp} \text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = 0$:

$$\text{tr} \underline{\underline{\sigma}}(t) = -3 p_c(t^{vp}) \quad (326)$$

Onde $p_c(t^{vp})$ é definido em (322). A taxa de deformação viscoplástica fica:

$$\underline{\underline{d}}^{vp} = -\frac{1}{3} \frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0} \underline{\underline{1}} = -\frac{1}{3} \dot{d}(t^{vp}) \underline{\underline{1}} \quad (327)$$

A relação constitutiva (297) reduz a:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = d(t) \left(2\mu \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 + \lambda \underline{1} \right) - K d(t^{vp}) \underline{1} \quad (328)$$

A integração de (328) entre t^{vp} e t fornece:

$$\underline{\underline{\sigma}}(t) = \underline{\underline{\sigma}}(t^p) - 2\mu \frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0} (t - t^{vp}) \left[\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 - \frac{1}{3} \underline{1} \right] \quad (329)$$

Deve-se observar que a ocorrência efetiva desta fase está sujeita a restrições relativas à carga aplicada. Na realidade, a consistência de (328) com uma condição de descarga $\text{tr} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = 0$ impõe que $\forall t \geq t^{vp}$:

$$\underbrace{\frac{\dot{\delta}(t)/h_0}{1 - \delta(t)/h_0}}_{d(t)} = \underbrace{\frac{\dot{\delta}(t^{vp})/h_0}{1 - \delta(t^{vp})/h_0}}_{d(t^{vp})} \quad (330)$$

Esta restrição indica que a fase elasto-viscoplástica vai ocorrer apenas para casos muito específicos de carregamento. Na verdade, os que satisfazem a condição (330).

4.4.2.5 Aplicação numérica

A ferramenta numérica é comparada com a solução analítica apresentada considerando os seguintes dados: módulo de Young $E = 100$ MPa, coeficiente de Poisson $\nu = 0.33$, pressão de consolidação plástica inicial $p_{c0} = 1.5$ MPa, módulo de endurecimento $m = 100$ MPa, pressão de consolidação viscoplástica $p_{vp} = 10$ MPa, medida de tensão de referência $f_0 = 1$, coeficiente de viscosidade $\eta = 10$ MPa×Ma, onde Ma significa milhões de anos.

O carregamento do VER é definido por um valor constante de taxa de compactação $\dot{\delta}/h_0 = 10$ m/Ma. Este carregamento não obedece a condição (330) e, portanto, o VER não sofrerá taxas de deformação irreversível puramente viscoplásticas ($\underline{\underline{d}}^{ir} = \underline{\underline{d}}^{vp}$).

O modelo numérico é composto por apenas 1 elemento. A equação (278) fornece $\Delta t_{ref}^{vp} = 10^5$ anos. O passo de tempo adotado é fixo, $\delta t = 100$ anos. A Figura 56 ilustra a evolução temporal do Jacobiano total J e sua parte plástica J^p para o problema proposto, apresentando uma excelente harmonia entre os resultados obtidos a partir das soluções analítica e numérica. Observa-se que a razão J/J^p representa, dentro do intervalo $t \geq t^p \approx 0.01$ Ma, uma medida da deformação volumétrica viscoplástica sofrida pelo VER. A Figura 57 apresenta a evolução das tensões horizontais $\sigma_H = \sigma_{11} = \sigma_{22}$ e vertical $\sigma_V = \sigma_{33}$ durante as diferentes fases de compactação. As curvas de evolução das tensões obtidas na análise numérica também apresentaram excelente concordância com as curvas da solução analítica.

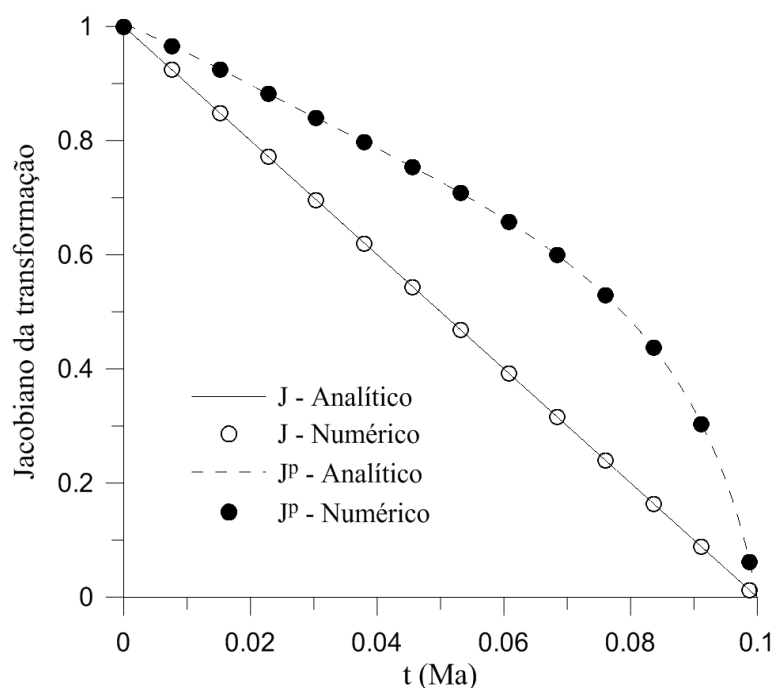


Figura 56: modelo simplificado de compactação: evolução dos Jacobianos

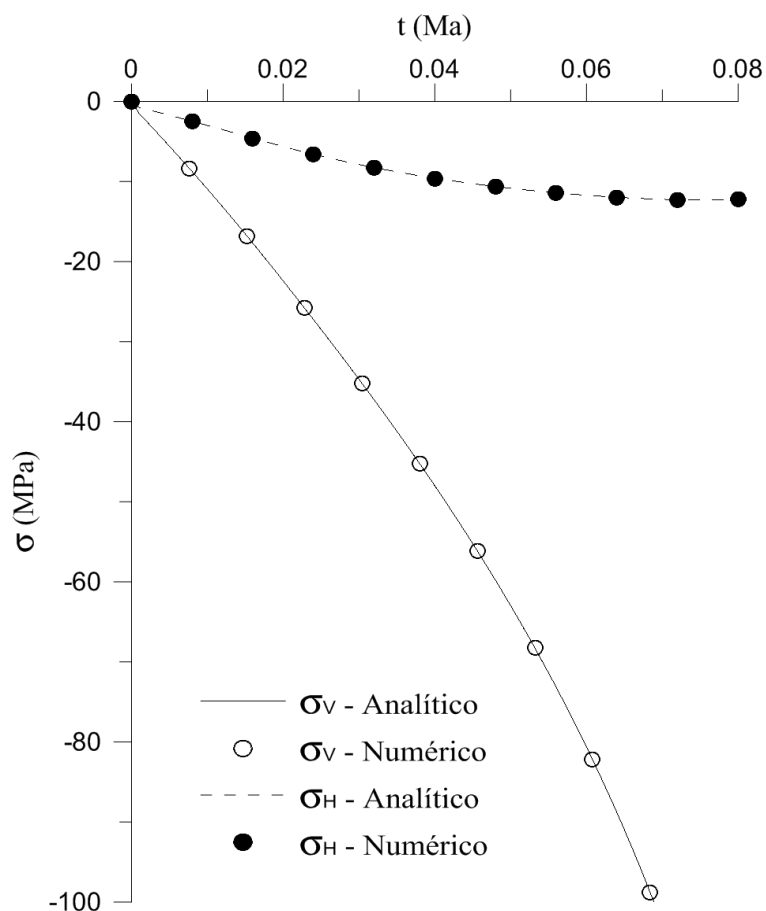


Figura 57: modelo simplificado de compactação: evolução das tensões

Do ponto de vista computacional, os resultados obtidos nas análises térmica e mecânica da seção 4.4 podem ser vistos como uma primeira validação da ferramenta numérica desenvolvida neste trabalho para lidar com a problemática da simulação de bacias sedimentares no contexto da termoporomecânica.

5 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS

Os capítulos 5 e 6 tratam das simulações numéricas de processos de deformação em bacias sedimentares realizadas com base no modelo constitutivo apresentado no capítulo 3 e na ferramenta numérica descrita no capítulo 4. Entende-se o problema da seguinte forma: sedimentos são depositados ao longo de milhões de anos em um assoalho oceânico plano, considerado rígido e impermeável. Enquanto as camadas são continuamente acrescidas na bacia, as camadas já depositadas encontram-se em processo de compactação gravitacional, onde os esforços gerados pelo peso das camadas sobrejacentes são suportados primeiramente pela água contida nos seus poros como excesso de poro-pressão, que com o passar do tempo diminui conforme a água é expulsa e o esforço é transferido para o esqueleto, que se deforma reduzindo a porosidade. Em um segundo momento começa o processo de compactação químico-mecânica nas camadas mais profundas da bacia, onde certos minerais são dissolvidos, transportados e precipitados nas paredes livres dos grãos, reduzindo ainda mais a porosidade. Todo este processo de deformação ocorre ao mesmo tempo em que as camadas depositadas são aquecidas devido ao fluxo térmico que ascende das camadas mais profundas. Portanto, ao mesmo tempo em que a evolução da porosidade modifica as propriedades termoporomecânicas do material sedimentar, a evolução da temperatura da bacia modifica continuamente suas propriedades físico-químicas, interferindo diretamente sobre os processos de compactação mecânica e químico-mecânica, o que faz com que o processo de compactação gravitacional da bacia seja de natureza completamente acoplada entre a deformação do esqueleto e o transporte de fluido e calor.

Após o término do período de deposição dos sedimentos, a bacia permanece em processo de compactação gravitacional até que a pressão retorne ao estado hidrostático, que os minerais encontrem-se em equilíbrio geoquímico, e que a bacia atinja equilíbrio térmico, cessando o fluxo de água e, portanto, cessando os processos de deformação, o que se caracteriza como a configuração assintótica da bacia. Em uma bacia real pode ser que este estado nunca seja atingido, já que diversos processos interferem constantemente no seu equilíbrio termoporomecânico, como o movimento das placas tectônicas, o calor produzido pelos processos radio-gênicos que ocorrem na litosfera e na astenosfera, as constantes mudanças nas propriedades físico-químicas dos minerais, processos de deposição e erosão sedimentar, entre outros.

Embora na grande maioria dos casos a tectônica de placas tenha papel fundamental na história de formação de bacias sedimentares, as deformações laterais induzidas por esforços compressivos e extensionais causadas por movimentos relativos que ocorrem entre placas não são consideradas neste trabalho. Para considerar tais fenômenos é necessário incorporar algoritmos numéricos capazes de lidar com as descontinuidades associadas às falhas que se desenvolvem na bacia. Ainda que seja de grande relevância, este assunto foge do escopo do presente trabalho, permanecendo como prioridade para desenvolvimentos futuros. Desta forma, a força externa que atua sobre a bacia sedimentar corresponde unicamente à ação da gravidade.

Do ponto de vista do modelo constitutivo do material sedimentar, duas grandes contribuições deste trabalho referem-se à incorporação da componente viscoplástica associada aos processos de deformação químico-mecânica, e aos efeitos da temperatura sobre as suas propriedades termopromecânicas. Para facilitar a compreensão dos efeitos destas contribuições sobre os processos de deformação da bacia, as simulações numéricas deste trabalho são divididas em três casos: 1) análise das deformações puramente mecânicas em condições isotérmicas; 2) análise das deformações mecânicas e químico-mecânicas em condições isotérmicas; 3) análise das deformações mecânicas e químico-mecânicas em condições não-isotérmicas. Os dois primeiros casos são abordados neste capítulo. O terceiro é apresentado no capítulo 6.

O problema analisado consiste em um cenário simplificado de formação de uma bacia sedimentar. A proposta não é estudar uma bacia real, mas investigar o comportamento do modelo constitutivo desenvolvido e a capacidade da ferramenta numérica de simular este processo. Considera-se a bacia com uma taxa de deposição sedimentar constante de $\dot{M}_d = 137 \text{ ton/km}^2$ por ano durante um período $t \in [0, T_{sed}]$. A quantidade total de sedimentos fornecidos corresponderia a uma coluna vertical de $\mathcal{H} = 6000 \text{ m}$ de altura na ausência de compactação, ou em outras palavras, se o material depositado fosse rígido. Assume-se as seguintes características para o problema poromecânico: a base da bacia é rígida e impermeável e encontra-se na cota $z = 0$; o contato entre a bacia e o assoalho oceânico é sem atrito; as laterais da bacia são impermeáveis; o nível do mar é fixo, localizado na cota $L_0 = 8000 \text{ m}$. A geometria e as condições de contorno do problema estão apresentadas na Figura 58 e nas expressões (331) a (334), onde $z = H(t)$ representa o topo da camada de sedimentos no instante t . Observa-se que as condições de contorno oedométricas impostas à bacia correspondem a um problema de evolução unidimensional associado a uma bacia com extensões laterais infinitas.

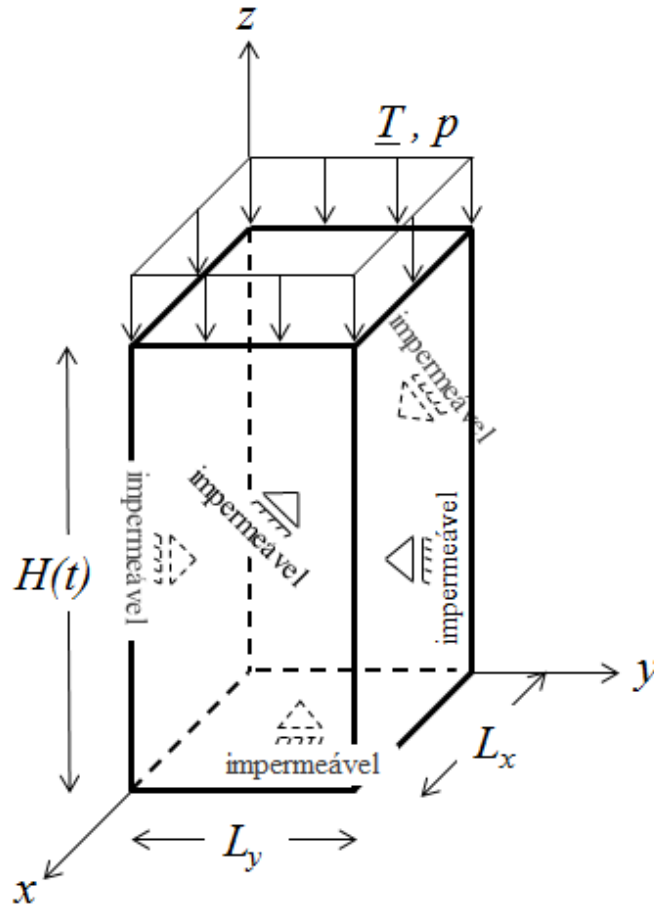


Figura 58: geometria e condições de contorno do modelo poromecânico

Em $x=0$ e $x=L_x$:

$$\underline{\xi} \cdot \underline{e}_x = 0 \qquad \underline{q}^f \cdot \underline{e}_x = 0 \qquad (331)$$

Em $y=0$ e $y=L_y$:

$$\underline{\xi} \cdot \underline{e}_y = 0 \qquad \underline{q}^f \cdot \underline{e}_y = 0 \qquad (332)$$

Em $z=0$:

$$\underline{\xi} \cdot \underline{e}_z = 0 \qquad \underline{q}^f \cdot \underline{e}_z = 0 \qquad (333)$$

Em $z=H(t)$:

$$\underline{T} = -\rho^f g (L_0 - H(t)) \underline{e}_z \qquad p = \rho^f g (L_0 - H(t)) \qquad (334)$$

O modelo constitutivo do material sedimentar corresponde ao apresentado no capítulo 3: trata-se de um meio poroso saturado com água, com comportamento plástico e viscoplástico definidos pelo modelo Cam-Clay modificado. A regra de fluxo plástico e a lei de encruamento adotada para a pressão de consolidação plástica estão apresentadas nas expressões (49) e (58), respectivamente, e a regra de fluxo viscoplástico e a lei de evolução da pressão de consolidação estática viscoplástica estão apresentadas nas expressões (66) e (70), respectivamente. O material é isotrópico e a evolução dos módulos elásticos drenados do esqueleto é determinada a partir dos limites variacionais superiores de Hashin-Shtrikman (71) e (72) em função da porosidade e dos módulos da fase sólida do esqueleto. Em condições isotérmicas, a lei de permeabilidade do material corresponde ao modelo de Kozeny-Carman apresentado em (75).

São consideradas as mesmas propriedades iniciais para todo material sedimentar depositado durante a formação da bacia: massa específica inicial $\rho_0 = 1.37 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, porosidade inicial $\phi_0 = 0.72$, módulo de Young inicial $E_0 = 10^3 \text{ MPa}$, coeficiente de Poisson inicial $\nu_0 = 0.33$, coeficiente de Biot inicial $b_0 = 0.98$, módulo de Biot inicial $M_0 = 2.22 \times 10^5 \text{ MPa}$, coeficiente de permeabilidade inicial $k_0^f = 10^{-9} \text{ MPa}^{-1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, inclinação da linha de estado crítico para plasticidade $M_{cs} = 1.2$, pressão de consolidação plástica inicial $p_{c0} = 1.5 \text{ MPa}$, inclinação da linha de estado crítico para viscoplasticidade $M_{vp} = 1.2$, pressão de consolidação estática viscoplástica inicial $p_{vp0}^s = 2.0 \text{ MPa}$, coeficiente de viscosidade inicial $\eta_{vp0} = 1 \text{ GPa} \times \text{Ma}$, expoente de viscosidade $n = 1$. A massa específica da água é constante $\rho^f = 10^3 \text{ kg/m}^3$.

A taxa de deposição sedimentar \dot{M}_d e a massa específica inicial ρ_0 do material correspondem a uma taxa de acréscimo de sedimentos de 100 m/Ma . De acordo com a espessura total de material depositado \mathcal{H} , pode-se obter o tempo total de deposição de sedimentos T_{sed} :

$$T_{sed} = \frac{\rho_0 \mathcal{H}}{\dot{M}_d} = 60 \text{ milhões de anos} \quad (335)$$

A discretização espacial da bacia é realizada por meio de uma coluna composta por 120 elementos hexaédricos, regularmente distribuídos ao longo da sua espessura, com altura inicial $h_0 = 50 \text{ m}$. A malha corresponde a 1448 nós e 4828 graus de liberdade (*gdl*). O passo de tempo do problema poromecânico é dinâmico, obtido de acordo com a equação (279).

5.1 SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO PURAMENTE MECÂNICA EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS

Para simular os processos de formação e deformação puramente mecânicas da bacia em condições isotérmicas, basta desativar o módulo térmico e adotar o parâmetro viscoplástico $m = 1$ referente à equação (70) da lei de evolução da pressão de consolidação estática p_{vp}^s . Como $p_{vp0}^s > p_{c0}$, a Figura 20 demonstra que com $m = 1$ tem-se $p_{vp}^s(J^{ir}) > p_c(J^{ir})$ para qualquer valor de J^{ir} , o que resulta na desativação da componente viscoplástica no modelo constitutivo do material sedimentar. Este estudo corresponde às análises feitas em Bernaud et al. (2006) e Maghous et al. (2014). Para facilitar a organização deste trabalho, a presente análise é identificada nas legendas das figuras e tabelas como caso 1.

A Figura 59 apresenta a lei de compactação gravitacional da bacia. Observa-se que ao final da fase de deposição sedimentar, $t = T_{sed} = 60$ Ma, a camada de sedimentos encontra-se na cota $H(T_{sed}) = 3484$ m. Para um instante de tempo t , a deformação global da bacia pode ser calculada pela razão $1 - H(t)/\mathcal{H}$. Os valores de deformação obtidos para $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$ são respectivamente: 29.7%, 41.9%, 54.3% e 57.5%. A curva indica que, para $t = 10T_{sed} = 600$ Ma, o processo de compactação gravitacional da bacia está praticamente estabilizado, com $H(10T_{sed}) = 2548$ m.

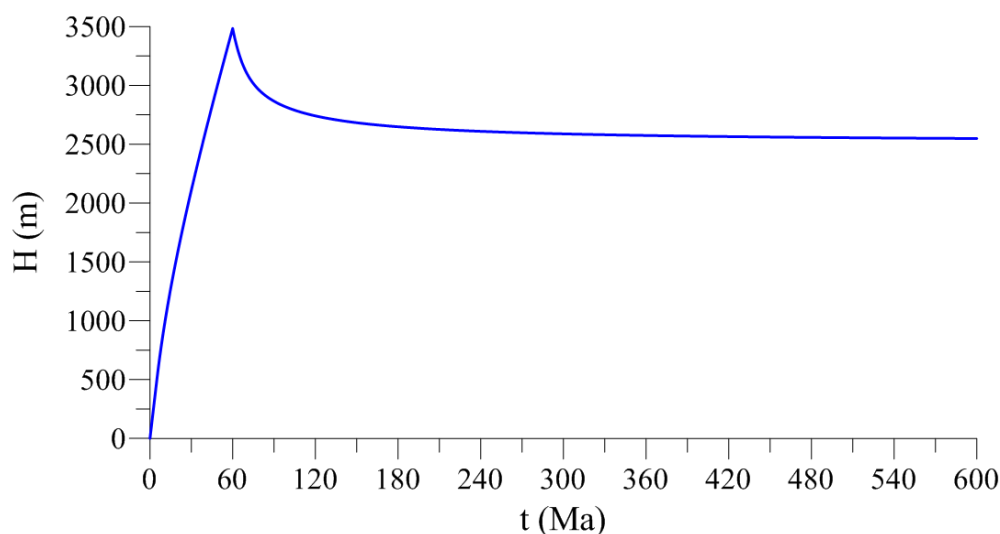


Figura 59: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 1)

Os níveis de compactação apresentados são qualitativamente compatíveis com o relatório de Hamilton (1959) a respeito de estimativas obtidas por meio de análises geoquímicas quanto ao volume sedimentar acumulado em bacias profundas. As análises indicam que mais de 5 km de argila seriam necessários para formar uma bacia com espessura estabilizada de cerca de 2 km. O grau de deformação apresentado na Figura 59 também evidencia a necessidade de se lidar com um modelo constitutivo para o material sedimentar formulado no contexto das grandes deformações, que leve em conta a evolução das suas propriedades poromecânicas em função das mudanças que ocorrem na sua microestrutura.

Antes de continuar com a análise da evolução do estado poromecânico da bacia, algumas questões referentes à discretização espacial e temporal do problema devem ser abordadas com o objetivo de avaliar a eficiência da ferramenta numérica desenvolvida. Este estudo é de grande importância em termos de precisão das soluções obtidas e otimização de tempo de processamento devido a natureza fortemente não-linear física e geométrica do modelo constitutivo utilizado para simular a história de uma bacia sedimentar em escala de tempo geológico, principalmente em problemas tridimensionais, onde o número de graus de liberdade do modelo aumenta de forma expressiva. A equação (275) indica que o passo de tempo numérico para o problema poromecânico é proporcional ao quadrado da altura do elemento. Isto significa que, em uma malha com elementos regularmente distribuídos, dobrar o número de elementos implica em dividir o passo de tempo da análise por quatro.

A investigação da dependência do tamanho dos elementos nos resultados e a sua influência sobre o passo de tempo do problema é feita a partir de quatro malhas de elementos finitos adotadas para discretizar a geometria da bacia, em conjunto com quatro valores empregados para discretizar o tempo. O estudo da discretização espacial é realizado adotando-se malhas com 20, 30, 60 e 120 elementos hexaédricos regularmente distribuídos ao longo da espessura da bacia, resultando em elementos com alturas iniciais h_0 de 300, 200, 100 e 50 metros, respectivamente. Como o passo de tempo é dinâmico ao longo da análise, modificado em função da altura dos elementos e das propriedades poromecânicas do material, o estudo da discretização temporal é realizado empregando-se quatro valores para o coeficiente β^f da expressão (279) que multiplica o passo de tempo mínimo obtido de acordo com a equação (280). Os valores escolhidos para β^f são: 0.5, 1, 5 e 10. A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos para a altura da bacia ao fim da fase de deposição $H(t = T_{sed})$ para cada caso estudado.

Tabela 1: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 1)

Propriedades da malha			$H(t = T_{sed})$			
<i>elementos</i>	<i>nós</i>	<i>gdl</i>	$\beta^f = 0.5$	$\beta^f = 1$	$\beta^f = 5$	$\beta^f = 10$
20	248	828	3565.8	3567.7	3619.7	3723.2
30	368	1228	3531.2	3531.4	3545.0	3580.1
60	728	2428	3499.1	3499.1	3499.7	3502.9
120	1448	4828	3484.0	3484.0	3483.9	3483.9

O passo de tempo mínimo inicial $\delta t_{0,min}^f$ fornecido pela equação (280) para os problemas com 20, 30, 60 e 120 elementos foram, respectivamente: 1875, 833.3, 208.3 e 52.1 anos. Se estes valores fossem mantidos fixos, seriam necessários 720 vezes mais passos de tempo para o caso da malha mais refinada com o menor passo de tempo (120 elementos com $\beta^f = 0.5$) em relação ao caso da malha mais grosseira com o maior passo de tempo (20 elementos com $\beta^f = 10$). O erro relativo entre os dois casos citados é de aproximadamente 7%, enquanto que o tempo de cálculo necessário foi cerca de 1000 vezes maior para o primeiro caso, sob as mesmas condições de processamento. Já para a malha com 30 elementos e $\beta^f = 10$, o erro relativo em relação à análise mais refinada foi inferior a 3%, e o tempo de processamento cerca de 250 vezes menor. Uma observação interessante é que para todas as análises realizadas com a malha de 120 elementos, os resultados foram praticamente iguais. Sendo assim, os resultados apresentados a seguir foram obtidos com a malha de 120 elementos e $\beta^f = 10$.

5.1.1 Caso 1: análise local

O objetivo neste momento é investigar a evolução do modelo constitutivo do material sedimentar. O estudo é realizado sobre a primeira camada que é depositada no assoalho oceânico, já que esta é a região que sofre maior grau de deformação ao longo da história da bacia. No modelo computacional, esta camada corresponde ao elemento localizado na cota $z = 0$.

A Figura 60 apresenta a evolução da parte plástica do Jacobiano da transformação na base da bacia. Nesta etapa tem-se $J^{ir} = J^p$, já que são consideradas apenas deformações puramente mecânicas (caso 1) e, portanto, toda contribuição à parte irreversível do Jacobiano deve-se unicamente à sua parte plástica. Observa-se que a fase elástica da deformação, considerada

infinitesimal no modelo constitutivo, ocorre para $0 \leq t \leq t^e \approx 6 \text{ Ma}$, seguida da fase plástica que permanece para todo $t \geq t^e$ ao longo da análise. A curva indica que o período com maior taxa de compactação ocorre entre $t = 6 \text{ Ma}$ e $t = 30 \text{ Ma}$, para o qual sua deformação volumétrica $\Delta V/V = 1 - J \approx 1 - J^p$ é aproximadamente 60%. A Figura 61 apresenta a velocidade do processo de compactação através da norma da taxa de deformação plástica $|\underline{\underline{d}}^p|$. A curva apresenta um pico em $t = 7 \text{ Ma}$ e depois decresce significativamente até $t = 30 \text{ Ma}$. Após o fim da fase de deposição, $t = 60 \text{ Ma}$, a camada segue deformando com taxas de compactação cada vez menores. Observa-se que para $t = 600 \text{ Ma}$ tem-se $J^p = 0.293$. Este valor respeita o limite $J^p > 1 - \phi_0 = 0.28$, que corresponde ao total fechamento dos poros do material.

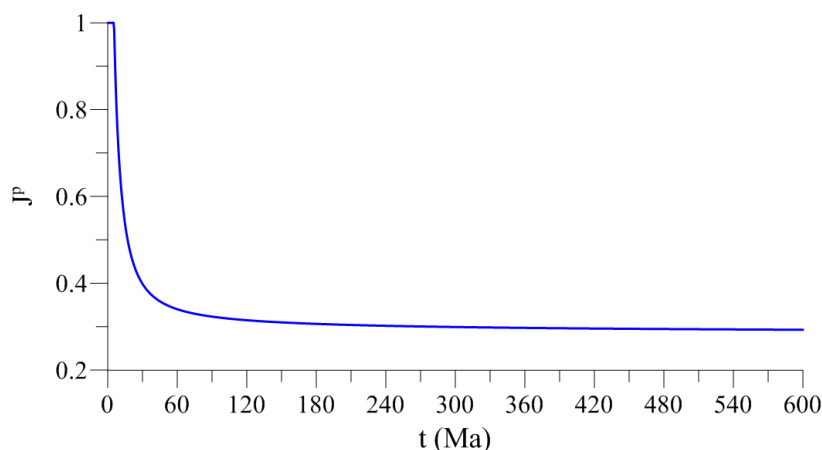


Figura 60: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia (caso 1)

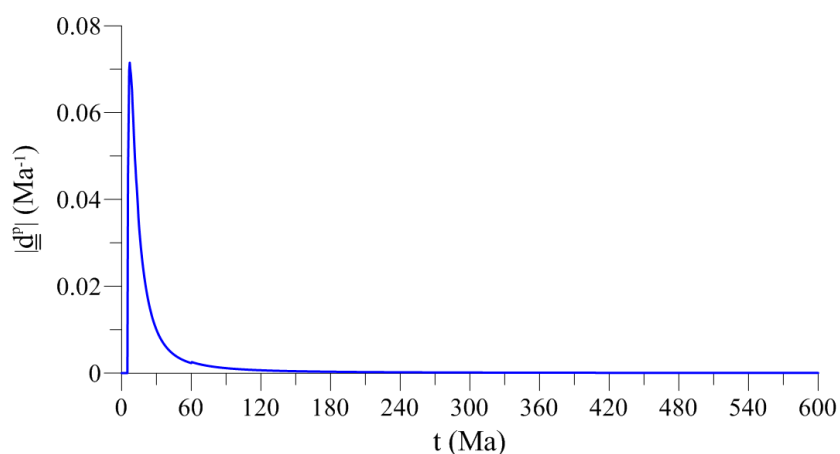


Figura 61: evolução da norma da taxa de deformação plástica na base da bacia (caso 1)

A Figura 62 apresenta a curva de evolução da porosidade. Como é função de J^{ir} , segundo a equação (47), a porosidade permanece constante durante a fase elástica da deformação $0 \leq t \leq t^e \approx 6$ Ma. A camada depositada com 72% de porosidade encontra-se aos 30, 60, 120 e 600 milhões de anos com valores de 29.7%, 17.7%, 11.1% e 4.4%, respectivamente.

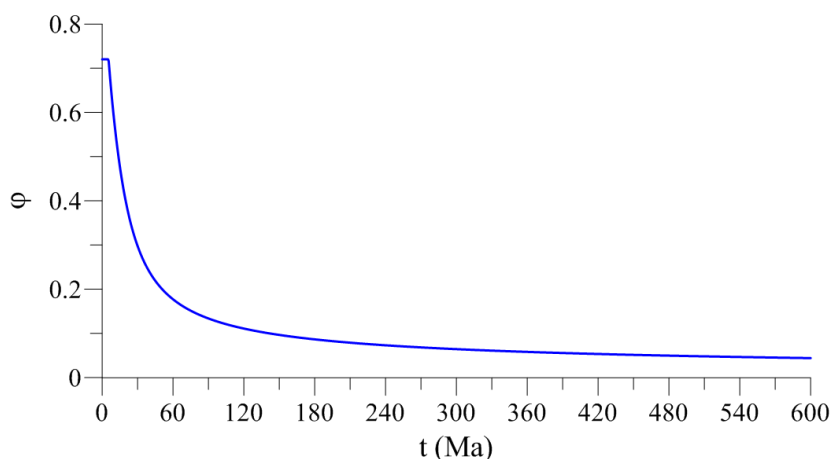


Figura 62: evolução da porosidade na base da bacia (caso 1)

A Figura 63 ilustra o histórico de poro-pressão na base da bacia. Em $t = 0$, a pressão é de 78.4 MPa, que corresponde ao peso da coluna d'água sobre a bacia. Sabe-se que quando uma carga é aplicada a um meio poroso saturado, ela é inicialmente suportada pelo fluido como excesso de poro-pressão, e com o passar do tempo é transferida para o esqueleto conforme o fluido é expulso dos seus poros, resultando na compactação da camada. Durante a fase de construção da bacia, os processos de carregamento e dissipação do excesso de poro-pressão ocorrem simultaneamente. No entanto, como a velocidade do carregamento é superior à capacidade do material de dissipar o excesso de poro-pressão, esta segue aumentando até o fim da fase de deposição dos sedimentos, $t = 60$ Ma, quando atinge 91 MPa. Uma vez que o carregamento é interrompido, a poro-pressão deve diminuir até que o regime hidrostático seja reestabelecido. Pode-se observar que o regime assintótico (hidrostático) não é atingido na curva de evolução de poro-pressão apresentada, onde para $t = 600$ Ma a pressão é de 83.8 MPa.

A Figura 64 apresenta a evolução da permeabilidade na base da bacia. Os valores foram normalizados em relação ao valor da permeabilidade inicial, k^f/k_0^f . No caso isotérmico, a permeabilidade evolui em função da porosidade segundo a equação (75). Observa-se que para $t = 30$ Ma, quando a porosidade é de 29.7%, a permeabilidade é de aproximadamente 1%

do seu valor inicial. Conforme o processo de compactação da camada continua, o valor da permeabilidade diminui de forma significativa, atingindo aproximadamente 0.2% e 0.04% do seu valor inicial para $t = 60$ Ma e $t = 120$ Ma, respectivamente. Isto explica a dificuldade do material em continuar com o processo de dissipação do excesso de poro-pressão.

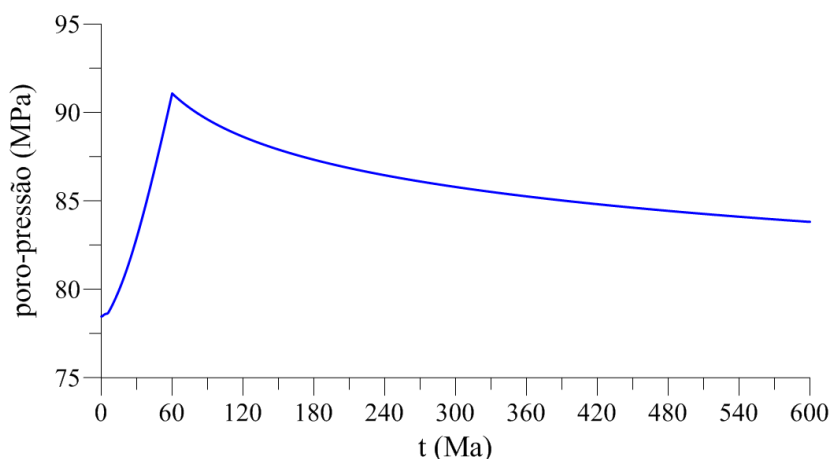


Figura 63: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 1)

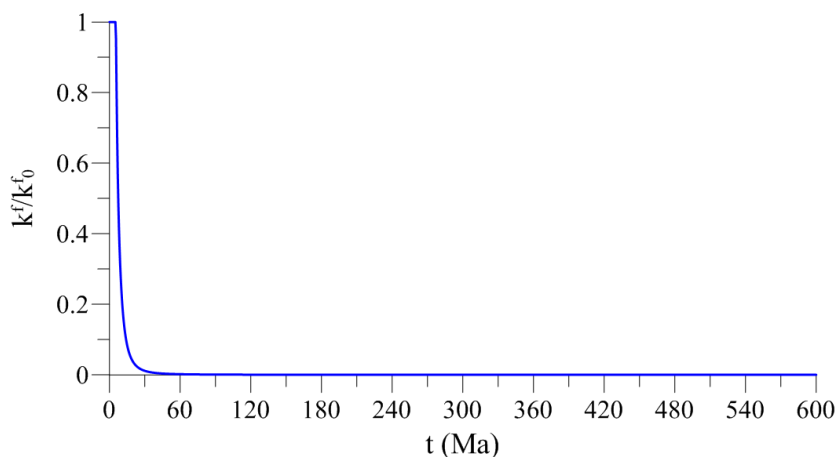


Figura 64: evolução da permeabilidade na base da bacia (caso 1)

A Figura 65 apresenta as curvas de tensão efetiva vertical e horizontal, que aumentam conforme o fluido é expulso e o esforço é transferido para o esqueleto do material. Para as idades de 30, 60, 120 e 600 milhões de anos da bacia, o valor da tensão efetiva vertical σ'_v na sua base é de, respectivamente, -6.3 MPa, -9 MPa, -11.4 MPa e -16.2 MPa, e da tensão efetiva horizontal σ'_H de, respectivamente, -4.2 MPa, -6 MPa, -7.6 MPa e -10.8 MPa.

A Figura 66 exibe a curva do coeficiente de empuxo lateral K_0 , parâmetro muito utilizado em análises clássicas da mecânica dos solos, definido pela razão entre a tensão efetiva horizontal e a tensão efetiva vertical, $K_0 = \sigma'_H / \sigma'_V$. Em análises tradicionais baseadas em cálculos unidimensionais, sua estimativa permite acessar as tensões efetivas horizontais a partir das tensões efetivas verticais obtidas. Ao longo da fase elástica, $0 \leq t \leq t^e \approx 6 \text{ Ma}$, tem-se $K_0 = \frac{\nu}{1-\nu} = 0.49$. Durante a fase plástica, $t \geq t^e$, tem-se o valor constante $K_0 = 0.67$. Segundo Pinto (2006), o valor de K_0 de um solo sedimentar arenoso situa-se entre 0.4 e 0.5, e para um solo sedimentar argiloso este valor se encontra entre 0.5 a 0.7.

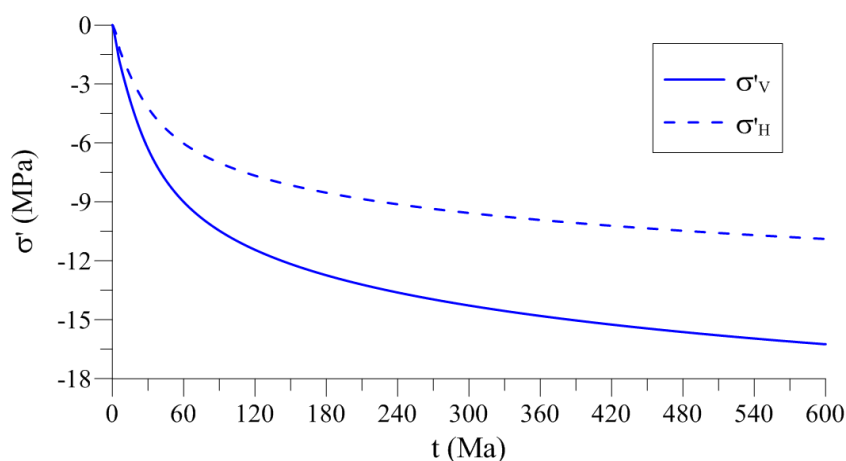


Figura 65: evolução das tensões efetivas na base da bacia (caso 1)

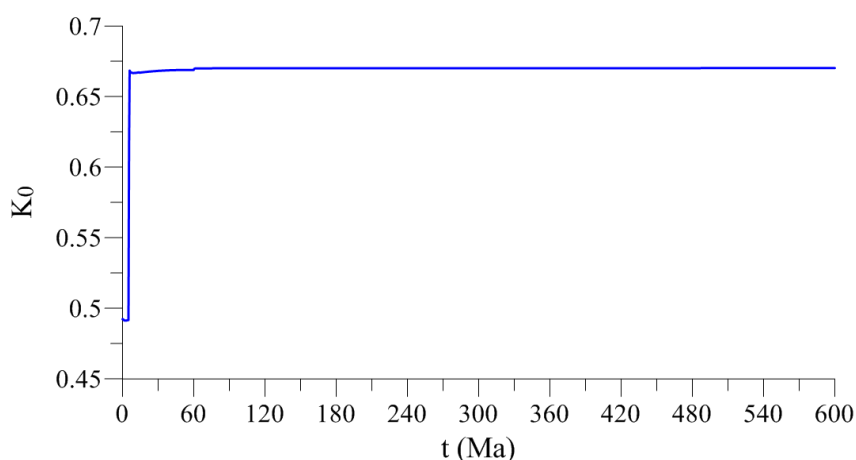


Figura 66: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 1)

A Figura 67 ilustra a trajetória da tensão efetiva média e da tensão desviadora entre $t = 0$ e $t = 600$ Ma, em conjunto com a linha de estado crítico do modelo plástico e das superfícies de escoamento f^p definidas para os instantes de tempo estudados. Durante a fase elástica, a trajetória seguiu com uma inclinação de 37.5° em relação ao eixo horizontal, e durante a fase plástica com uma inclinação de 22.9° . A mudança de direção desta trajetória, assim como a mudança do valor obtido para o coeficiente K_0 em $t \approx 6$ Ma, ocorre devido à transição de regime elástico para plástico, que modifica as relações constitutivas do material a partir do início da plasticidade, de acordo com a regra de fluxo plástico adotada. Observa-se que a trajetória das tensões permaneceu no lado direito da linha de estado crítico, a qual tem inclinação de 50.2° em relação ao eixo horizontal, o que indica compactação do material.

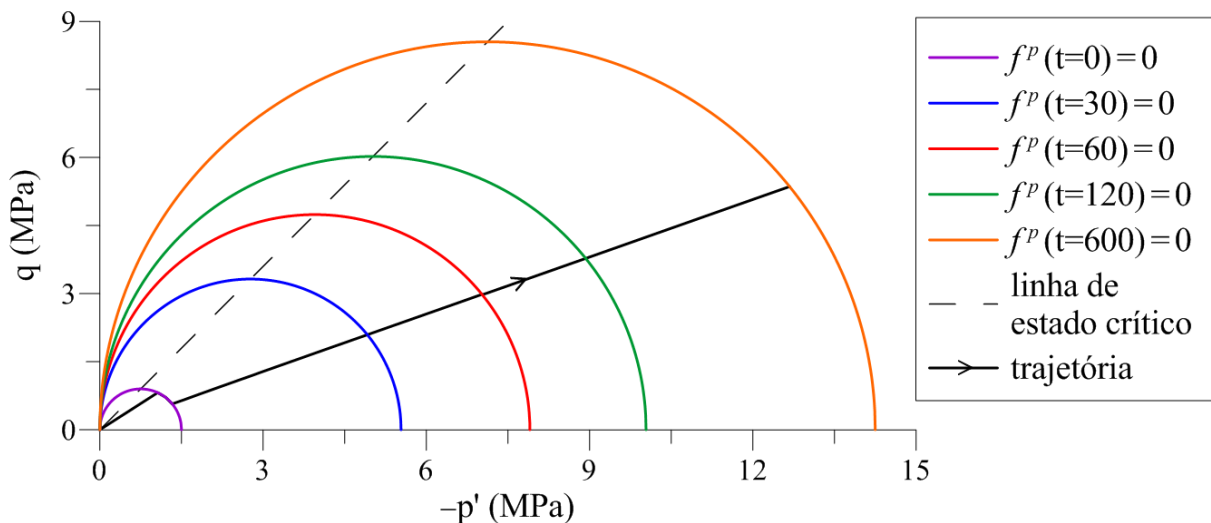


Figura 67: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia (caso 1)

A Figura 68, Figura 69, e Figura 70 apresentam, respectivamente, a evolução da pressão de consolidação plástica, massa específica e módulo de Young na base da bacia. Estes três parâmetros evoluem em função da porosidade: o primeiro a partir de uma função logarítmica, o segundo uma função linear, e o terceiro está relacionado aos módulos de compressão e cisalhamento do material por meio da relação $E = \frac{9K\mu}{3K + \mu}$, determinados em função da porosidade a partir dos limites variacionais superiores de Hashin-Shtrikman. Em $t = 600$ Ma, os valores atingidos na base da bacia foram $p_c = 14.2$ MPa, $\rho = 2263$ kg/m³ e $E = 5476$ MPa.

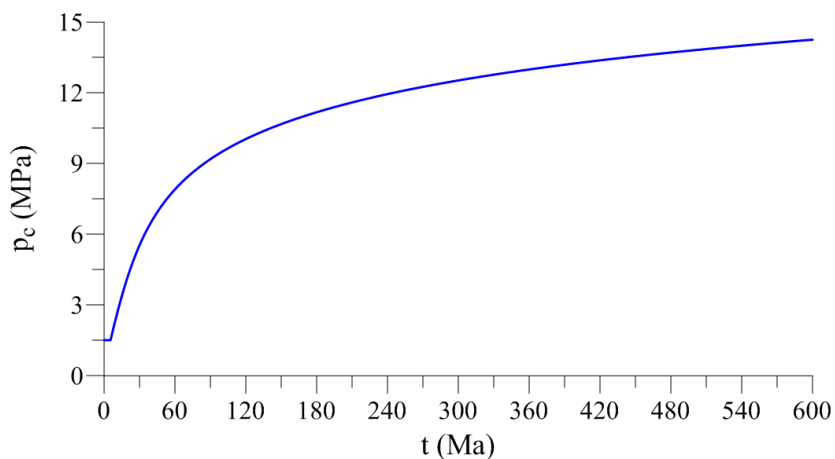


Figura 68: evolução da pressão de consolidação plástica na base da bacia (caso 1)

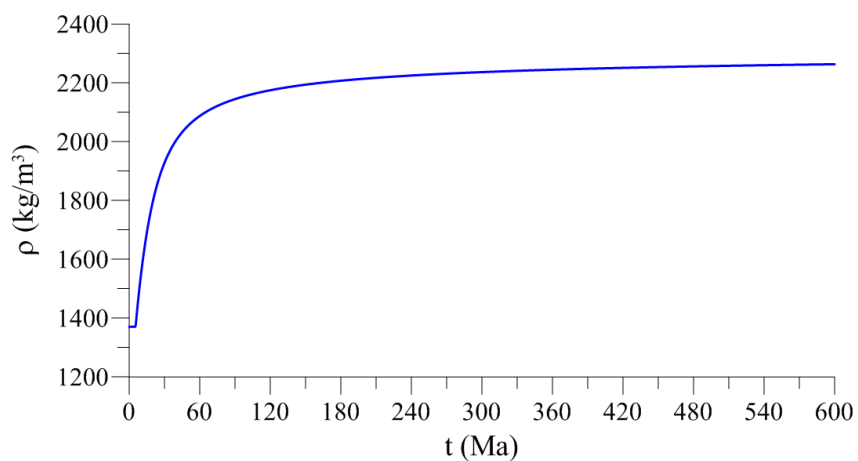


Figura 69: evolução da massa específica na base da bacia (caso 1)

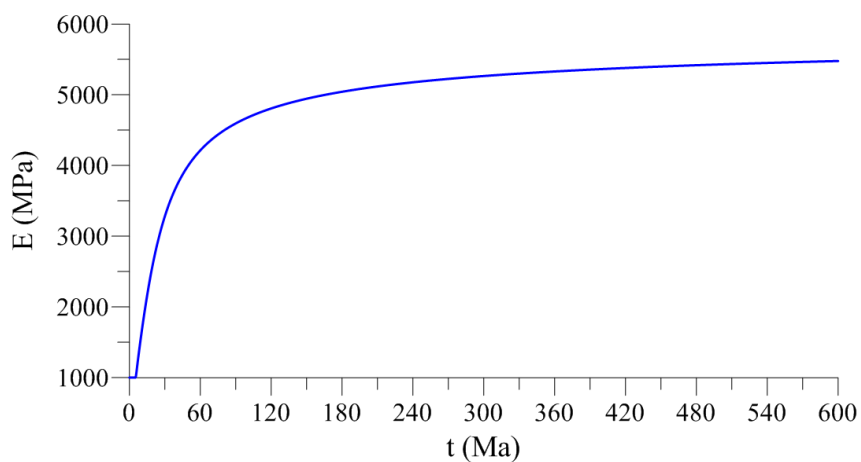


Figura 70: evolução do módulo de Young na base da bacia (caso 1)

A Figura 71, Figura 72 e Figura 73 apresentam, respectivamente, as curvas do módulo de compressão, coeficiente de Biot e do módulo de Biot, cujas leis de evolução estão descritas em função da porosidade nas equações (71), (73) e (74). Enquanto o módulo de compressão apresenta comportamento crescente, e o coeficiente de Biot comportamento decrescente ao longo de toda a análise, o módulo de Biot decresce entre $6 \leq t \leq 60$ Ma, e depois cresce até o fim da análise. Esta mudança de comportamento se deve à evolução da relação $b-\varphi$, que passa de uma função crescente para decrescente após $t=60$ Ma. Observa-se também que, assim como p_c , ρ e E , os parâmetros K , b e M permanecem constantes durante a fase elástica da transformação, $0 \leq t \leq t^e \approx 6$ Ma, já que evoluem de acordo com φ , função das deformações de caráter irreversível sofridas pelo material.

Ao fim da análise, $t=600$ Ma, os valores atingidos na base da bacia foram $K=28505$ MPa, $b=0.51$ e $M=124838$ MPa. Segundo Coussy (2004), arenitos podem apresentar: $2\% \leq \varphi \leq 26\%$, $4600 \leq K \leq 13000$ MPa, $0.69 \leq b \leq 0.85$ e $M \approx 17000$ MPa, e calcários: $4\% \leq \varphi \leq 29\%$, $5000 \leq K \leq 39000$ MPa, $0.34 \leq b \leq 0.88$ e $100000 \leq M \leq 400000$ MPa. Embora não se esteja simulando nenhum material específico, os resultados obtidos estão mais próximos de um calcário do que de um arenito.

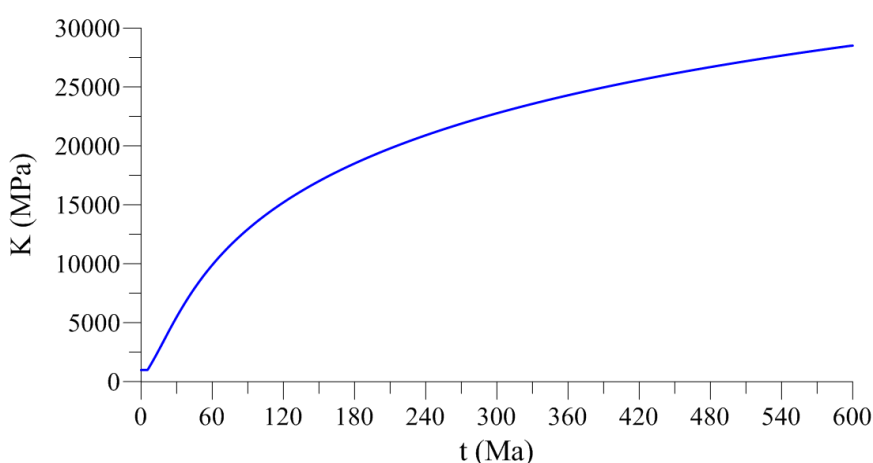


Figura 71: evolução do módulo de compressão na base da bacia (caso 1)

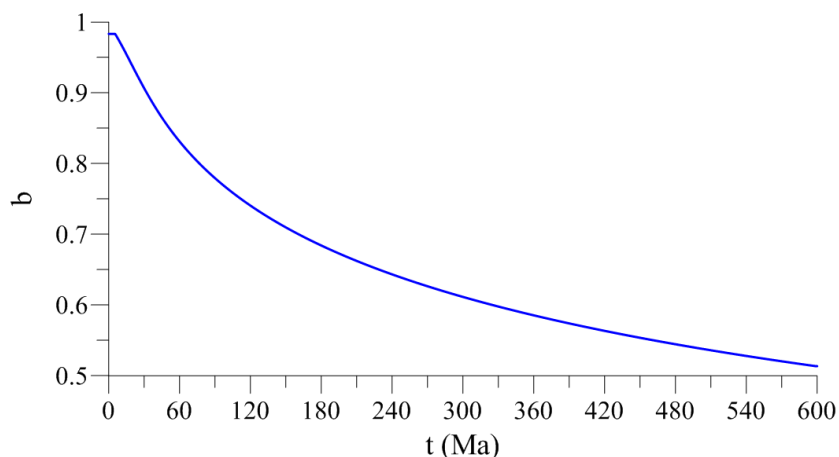


Figura 72: evolução do coeficiente de Biot na base da bacia (caso 1)

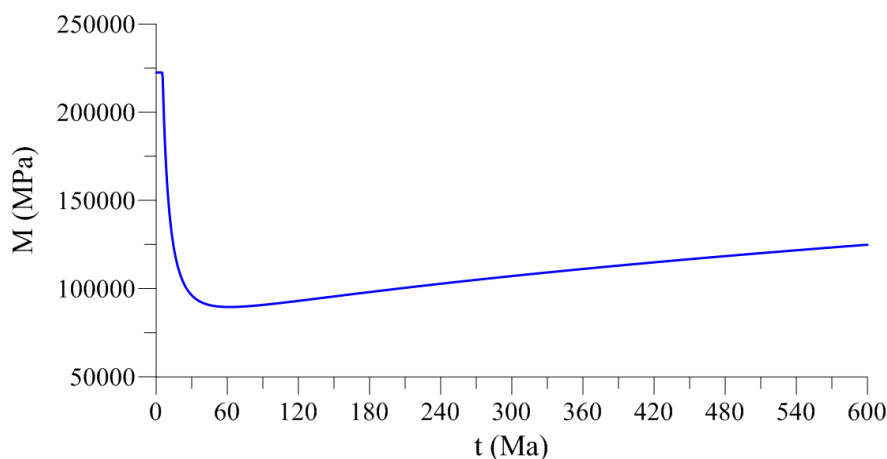


Figura 73: evolução do módulo de Biot na base da bacia (caso 1)

A Figura 74 e a Figura 75 apresentam a evolução do coeficiente de difusividade líquida e do passo de tempo poromecânico Δt_{ref}^f , obtidos das equações (275) e (276), respectivamente. O coeficiente de difusividade depende de diversos parâmetros que estão em constante evolução, alguns com comportamento crescente e outros decrescente. No entanto, investigando as curvas e os valores de todos os parâmetros que o definem, observa-se que o coeficiente de permeabilidade tem papel dominante no seu comportamento, resultando em uma curva para c_m muito semelhante à curva k^f/k_0^f , apresentada na Figura 64.

Analisando a Figura 75 pode-se dizer que, para o problema considerado, o coeficiente de difusividade tem papel dominante na evolução de Δt_{ref}^f , embora este seja proporcional ao quadrado da altura do elemento, que diminui conforme o processo de compactação avança. O

valor do passo de tempo de referência da camada de sedimentos localizada na base da bacia parte de $\Delta t_{ref}^f = 52.1$ anos em $t = 0$ para $\Delta t_{ref}^f = 5512.8$ anos para $t = 600$ Ma. Isto não significa que este seja o valor adotado ao longo da análise numérica, pois, de acordo com as equações (279) e (280), o passo de tempo δt é definido a partir do menor valor de Δt_{ref}^f , obtido por meio de uma varredura em todos os elementos que compõe a malha de elementos finitos.

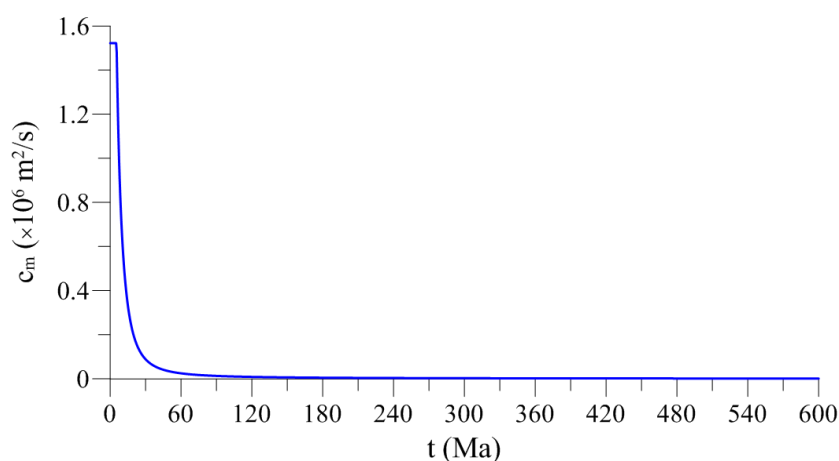


Figura 74: evolução do coeficiente de difusividade líquida na base da bacia (caso 1)

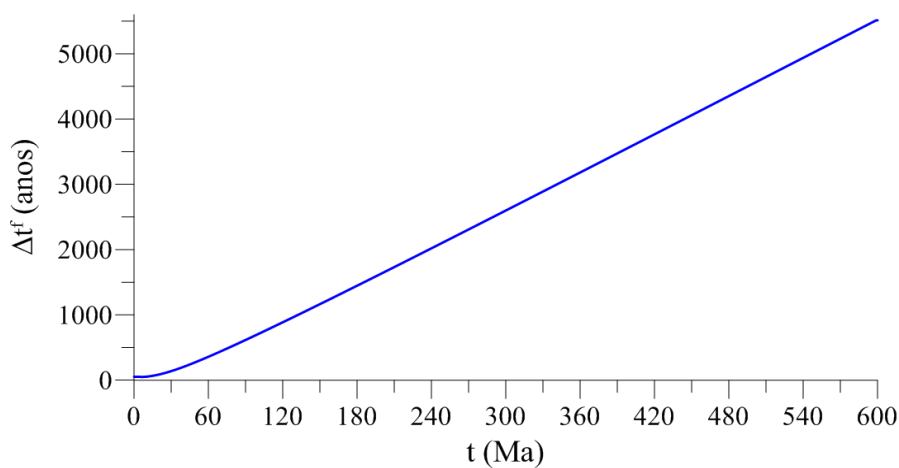


Figura 75: evolução do passo de tempo Δt_{ref}^f na base da bacia (caso 1)

5.1.2 Caso 1: análise global

A análise local das deformações que ocorreram na base da bacia proporcionou uma melhor compreensão da evolução do modelo constitutivo utilizado para o material sedimentar. O objetivo agora é realizar uma análise global da bacia e investigar o seu comportamento poromecânico ao longo do processo de compactação gravitacional. Optou-se por analisar as configurações obtidas nos instantes $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$, que correspondem, respectivamente, a 30, 60, 120 e 600 milhões de anos de idade da bacia.

A Figura 76 apresenta os perfis de Jacobiano plástico na bacia para as diferentes idades selecionadas. Para todas as idades verifica-se a existência de uma camada localizada no topo da bacia onde a parte plástica do Jacobiano permaneceu com valor unitário, $J^p = 1$. Isto significa que estas regiões da bacia que permaneceram no regime elástico de deformação. As configurações obtidas para 30, 60, 120 e 600 milhões de anos indicam uma espessura desta camada elástica de aproximadamente 800, 925, 475 e 425 metros, respectivamente.

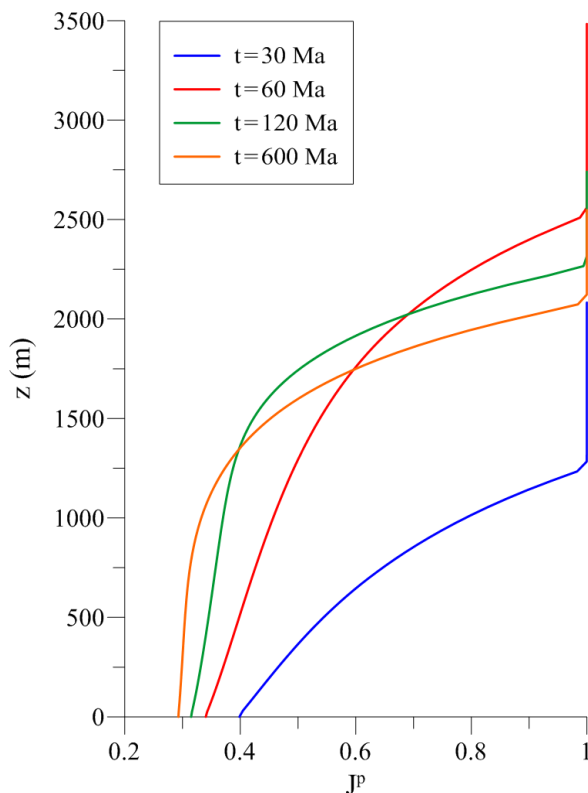


Figura 76: perfil de Jacobiano plástico na bacia (caso 1)

Os perfis de porosidade estão ilustrados na Figura 77. Como é função da parte irreversível do Jacobiano da transformação $J^{ir} \rightarrow \varphi(J^{ir})$, as regiões onde se obteve $J^{ir} = J^p = 1$ não apresentaram variação de porosidade e permaneceram com as propriedades iniciais do material depositado, já que estes parâmetros evoluem de acordo com as mudanças da sua microestrutura, representada pela variação de porosidade. Ao fim do período de deposição da bacia, $t = 60$ Ma, todas as camadas encontram-se com porosidade acima de 15%, enquanto que para a configuração final, $t = 600$ Ma, a região inferior da bacia com aproximadamente 700 metros de espessura apresenta porosidade abaixo de 10%, atingindo 4.4% na sua base.

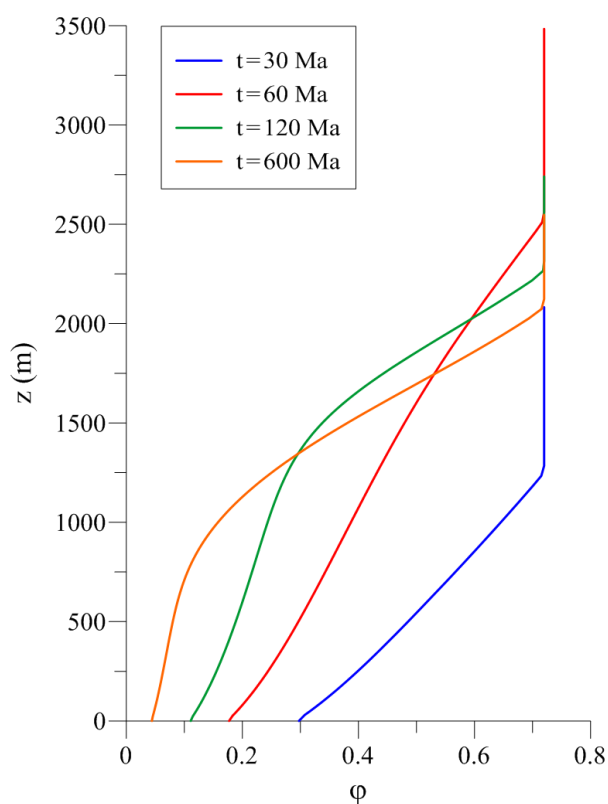


Figura 77: perfil de porosidade na bacia (caso 1)

A Figura 78 e a Figura 79 ilustram, respectivamente, os perfis de poro-pressão e de permeabilidade normalizado na bacia. Pode-se ver que as configurações apresentadas para $t = 30$ Ma e $t = 60$ Ma apresentam excesso de poro-pressão ao longo de toda a altura da bacia, já que a primeira se encontra em processo de carregamento e a segunda corresponde ao exato instante em que se encerra a fase de deposição de sedimentos, a partir do qual a bacia tende a retornar ao estado hidrostático de pressão ao longo do processo de deformação mecânica.

O progresso da dissipação das pressões pode ser observado ao longo dos perfis traçados para $t = 120 \text{ Ma}$ e $t = 600 \text{ Ma}$, no qual existe uma zona com cerca de 1000 metros de espessura que ainda apresenta excesso de poro-pressão, embora o processo de compactação gravitacional da bacia esteja praticamente estabilizado, com velocidade inferior a 10 cm/Ma . A equação de Kozeny-Carman indica que $k^f \rightarrow 0$ quando $\phi \rightarrow 0$, o que leva a um coeficiente de permeabilidade muito baixo para as camadas inferiores da bacia e faz com que seja necessário ainda muito tempo para reduzir de forma significativa o excesso de poro-pressão remanescente.

De acordo com a lei de Darcy utilizada para descrever o movimento do fluido dentro do meio poroso, a condição de impermeabilidade na base da bacia $\underline{q}^f \cdot \underline{e}_z = 0$ fornece $\partial p / \partial z = \rho^f g$, que para o caso da água como fluido saturante resulta em $\partial p / \partial z \approx 0.01 \text{ MPa/m}$. Este valor é verificado para $z = 0$ ao longo de toda a análise, o que indica que esta condição de contorno está sendo adequadamente respeitada na simulação computacional.

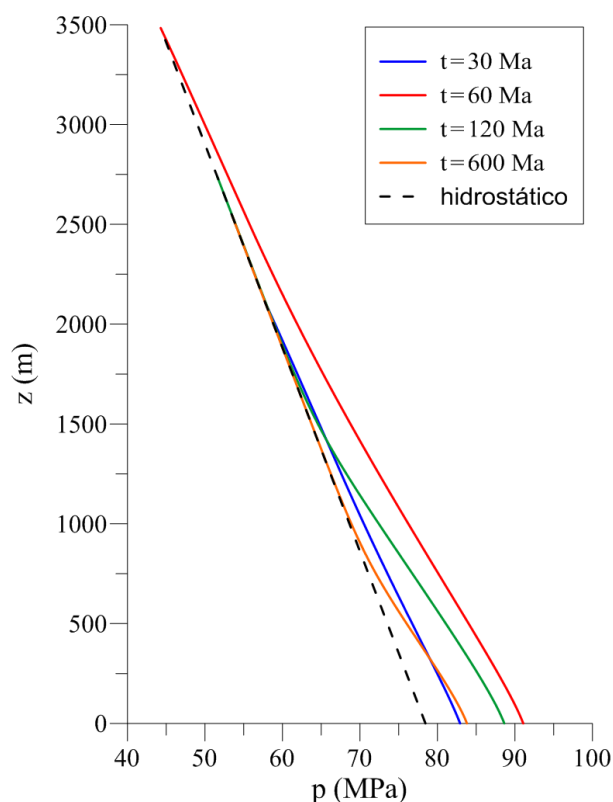


Figura 78: perfil de poro-pressão na bacia (caso 1)

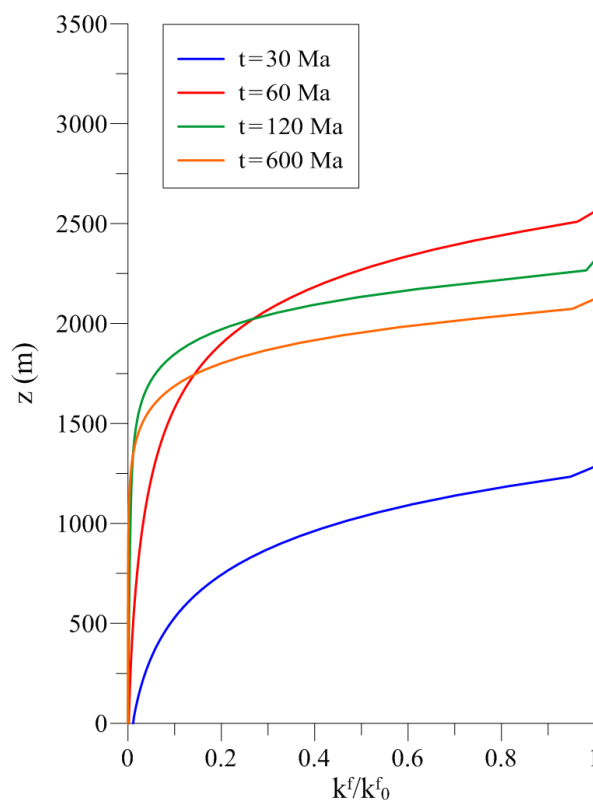


Figura 79: perfil de permeabilidade na bacia (caso 1)

A Figura 80 e a Figura 81 mostram os perfis de tensão efetiva média e de relação $-q/p'$ ao longo da profundidade da bacia, respectivamente. Nota-se uma descontinuidade nas curvas da tensão efetiva média nos locais em que ocorrem as transições dos regimes de deformação elástica para plástica. Este fenômeno está associado à mudança na relação constitutiva do material sedimentar, ilustrado na trajetória $-p' \times q$ da Figura 67.

A relação $-q/p'$ fornece informações sobre a variação volumétrica plástica do material definida pelo modelo Cam-Clay, quando comparada ao valor adotado para a inclinação da linha de estado crítico M_{cs} . Como se trata de uma informação referente ao comportamento plástico do material, os valores obtidos na zona elástica não tem significado físico nenhum. As curvas mostram que para todas as idades da bacia, as regiões que se encontram no domínio plástico apresentam $-q/p'=0.42$ constante ao longo da profundidade, que em comparação ao valor adotado para $M_{cs}=1.2$ indica que o material está em processo de compactação $\Delta V/V < 0$. Os resultados apresentados na Figura 81 são compatíveis com a Figura 67 e mostram que as trajetórias no espaço das tensões $(-p'; q)$ são paralelas nas diferentes camadas da bacia em que ocorreram deformações plásticas.

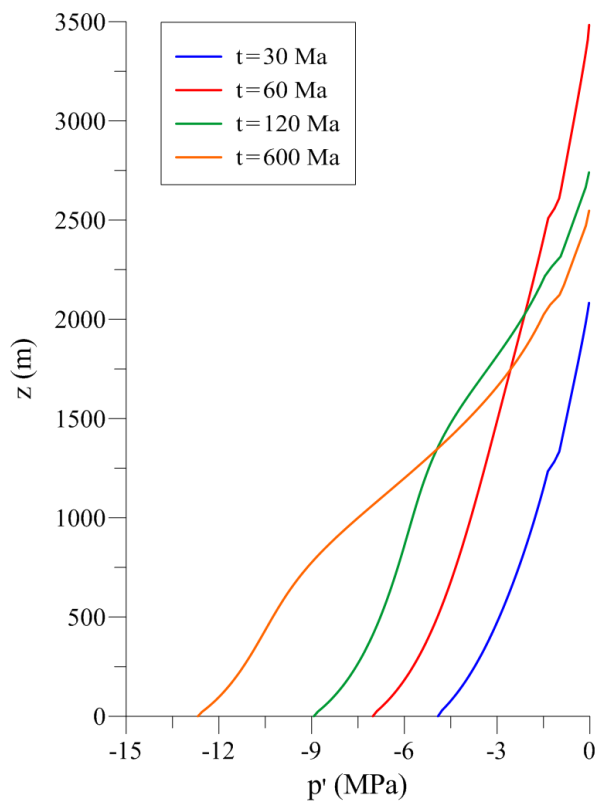


Figura 80: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 1)

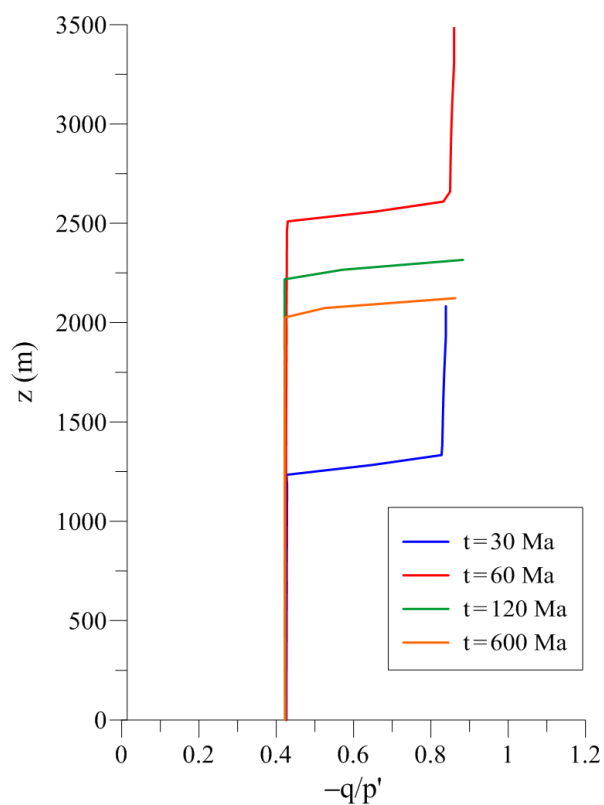


Figura 81: perfil de relação tensão desviadora/tensão efetiva média na bacia (caso 1)

A Figura 82 exibe os perfis do coeficiente de empuxo lateral K_0 . Na prática da engenharia, este coeficiente é frequentemente considerado constante ao longo da profundidade de um solo ou de uma bacia sedimentar. As camadas elásticas localizadas no topo da bacia apresentaram valores em torno de 0.45, enquanto que as camadas que sofreram deformações plásticas apresentaram valores constantes $K_0 = 0.67$ ao longo de toda a profundidade da bacia.

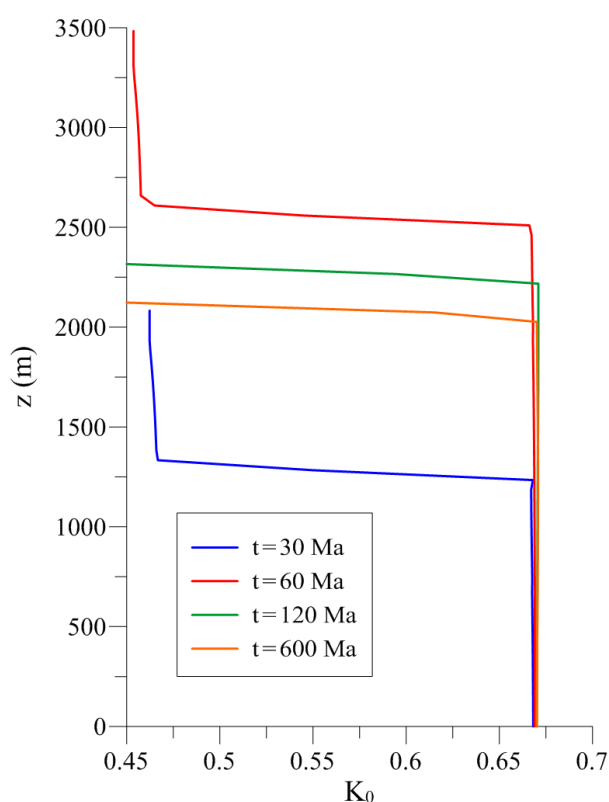


Figura 82: perfil de coeficiente K_0 na bacia (caso 1)

Uma análise interessante a ser feita é o estudo da evolução da tensão efetiva horizontal média Σ'_H que atua nas laterais da bacia para mantê-la em condições oedométricas ao longo do processo de compactação gravitacional. Esta curva, representada na Figura 83, demonstra que a maior taxa de crescimento dos esforços laterais ocorre durante a fase de deposição sedimentar. Ao fim desta fase, $t = 60$ Ma, a interrupção do carregamento provoca uma descontinuidade na inclinação $\partial\Sigma'_H/\partial t$, e a tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia segue em evolução em conjunto com o processo de dissipação do excesso de poro-pressão, tendendo a um valor assintótico $\partial\Sigma'_H/\partial t = 0$ conforme o processo de compactação se estabiliza.

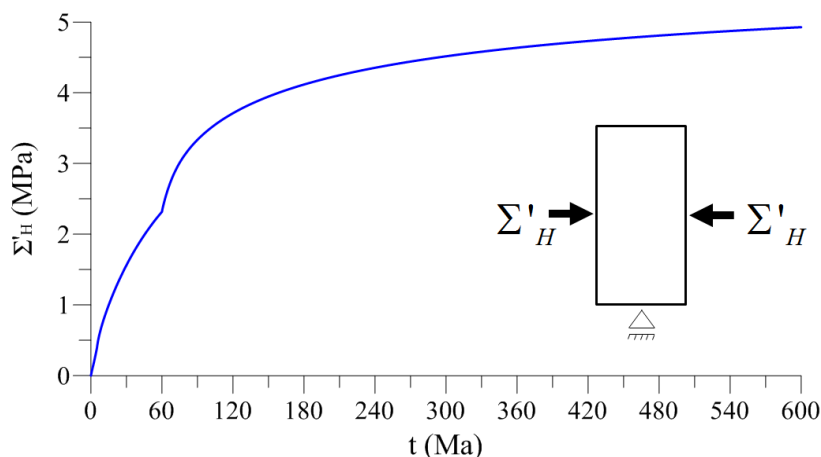


Figura 83: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 1)

A Figura 84 apresenta os perfis de coeficiente de difusividade líquida ao longo da profundidade da bacia para as diferentes idades selecionadas. As curvas apresentam comportamento muito semelhante às curvas de permeabilidade da Figura 79, já que este é o parâmetro de maior influência sobre o coeficiente c_m . Como as camadas superiores da bacia permaneceram no regime elástico e, portanto, não apresentaram variação de porosidade e demais propriedades poromecânicas associadas, o coeficiente de difusividade destas camadas permaneceu inalterado. Desta forma, embora as camadas mais profundas apresentem uma diminuição expressiva do coeficiente de difusividade, o que levaria a um aumento significativo do passo de tempo poromecânico utilizado na análise numérica e um ganho significativo no tempo global de processamento computacional, a evolução do passo de tempo do módulo poromecânico permanece controlada pelas camadas sedimentares localizadas no topo da bacia.

A Figura 85 apresenta a evolução do passo de tempo mínimo δt_{min}^f fornecido pela equação (280) ao longo da análise. Este valor é obtido por meio de uma varredura em todos elementos da malha que busca o menor passo de tempo Δt_{ref}^f , definido pela equação (275). O fato das camadas localizadas na região superior da bacia permanecerem com c_m constante faz com que a variação de Δt_{ref}^f ocorra unicamente devido à variação da altura h dos seus elementos. Como as deformações elásticas são consideradas infinitesimais no modelo constitutivo do material sedimentar, a variação da altura destes elementos é muito pequena e, portanto, a variação do passo de tempo Δt_{ref}^f destes elementos em relação ao seu valor inicial também é muito pequena. Assim, o passo de tempo δt_{min}^f permanece praticamente constante ao longo de toda a análise realizada, como mostra a curva de evolução da Figura 85, lembrando que o pas-

so de tempo δt adotado no módulo poromecânico resulta da multiplicação de δt_{min}^f com β^f , como mostra a equação (279), e que na presente análise foi utilizado $\beta^f = 10$.

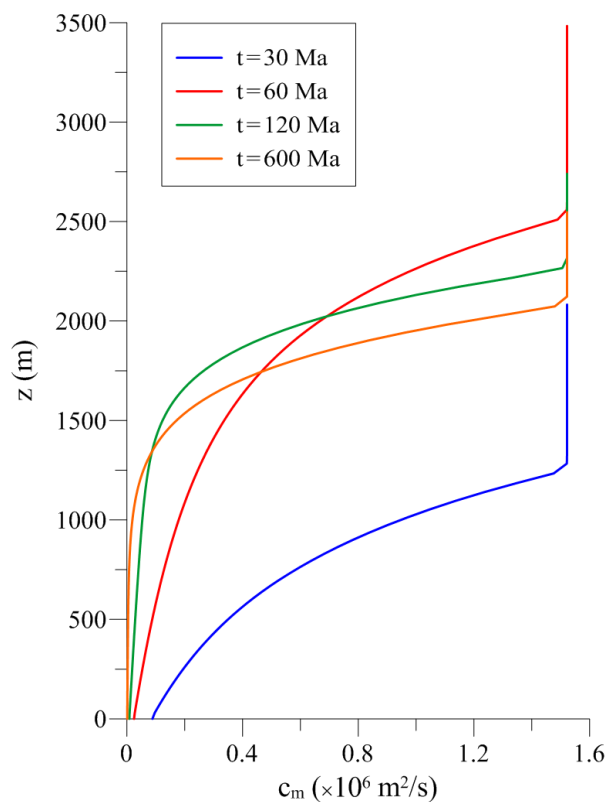


Figura 84: perfil de coeficiente de difusividade líquida na bacia (caso 1)

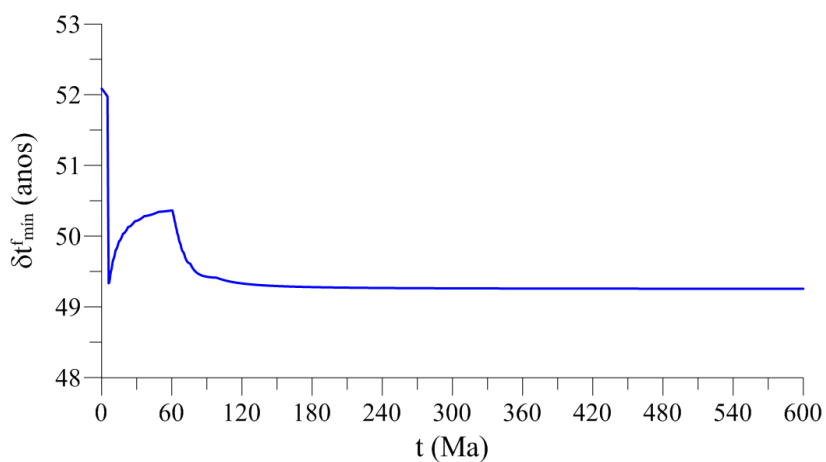


Figura 85: evolução do passo de tempo δt_{min}^f ao longo da análise (caso 1)

5.1.3 Caso 1: análise paramétrica

Para melhor investigar alguns aspectos do comportamento poromecânico da bacia, optou-se por realizar algumas análises paramétricas referentes ao processo de formação e deformação mecânica. Todas as análises paramétricas foram realizadas com malhas de 60 elementos regularmente distribuídos ao longo da espessura da bacia e $\beta^f = 10$.

5.1.3.1 Taxa de deposição sedimentar

Para estudar os efeitos da taxa de deposição sedimentar sobre o comportamento da bacia, diferentes valores foram adotados para \dot{M}_d , considerada constante ao longo de todo o período de deposição. Todos os demais dados do problema permaneceram inalterados. Além da taxa de referência, $\dot{M}_d = 137 \text{ ton/km}^2$ por ano, os valores adotados foram $\dot{M}_d = 109.6 \text{ ton/km}^2$ por ano e $\dot{M}_d = 164.4 \text{ ton/km}^2$ por ano, que divididos pela massa específica inicial ρ_0 do material depositado correspondem às taxas de deposição de 80 m/Ma e 120 m/Ma, e associados à quantidade de material fornecido $\mathcal{H} = 6000 \text{ m}$, resultam nos períodos de deposição sedimentar $T_{sed} = 75 \text{ Ma}$ e $T_{sed} = 50 \text{ Ma}$, respectivamente.

As leis de compactação gravitacional da bacia para as duas novas taxas de deposição propostas, assim como para o problema original, estão apresentados na Figura 86. Como a quantidade de material depositado é igual para todos os casos, a carga total aplicada permanece a mesma e, portanto, aumentar ou diminuir a taxa de deposição sedimentar implica apenas em aumentar ou diminuir a velocidade do carregamento imposto à bacia, já que no processo de compactação gravitacional o carregamento corresponde unicamente ao peso dos sedimentos.

Ao fim da fase de deposição, a altura da bacia $H(t = T_{sed})$ é maior para a curva com velocidade de deposição sedimentar de 120 m/Ma do que para as velocidades de 100 m/Ma e 80 m/Ma, já que corresponde a um instante de tempo menor, $T_{sed} = 50 \text{ Ma}$, em comparação aos demais, $T_{sed} = 60 \text{ Ma}$ e $T_{sed} = 75 \text{ Ma}$, respectivamente. No entanto, comparando a altura de todas as curvas no instante $t = 75 \text{ Ma}$, observa-se que as bacias que foram formadas mais cedo apresentam maior grau de compactação, pois tiveram mais tempo para dissipar seu ex-

cesso de poro-pressão. Após $t \approx 120$ Ma as três curvas coincidem, e ao fim da análise, $t = 600$ Ma, todas as bacias apresentam o mesmo grau de compactação.

A Figura 87 apresenta a evolução da poro-pressão na base da bacia para as diferentes taxas de deposição sedimentar. Pode-se ver que quanto maior a velocidade do carregamento, maior o pico de pressão obtido em $t = T_{sed}$. Assim como para as curvas de compactação, as curvas de pressão passam a se sobrepor a partir de $t \approx 120$ Ma e assim seguem até o fim da análise.

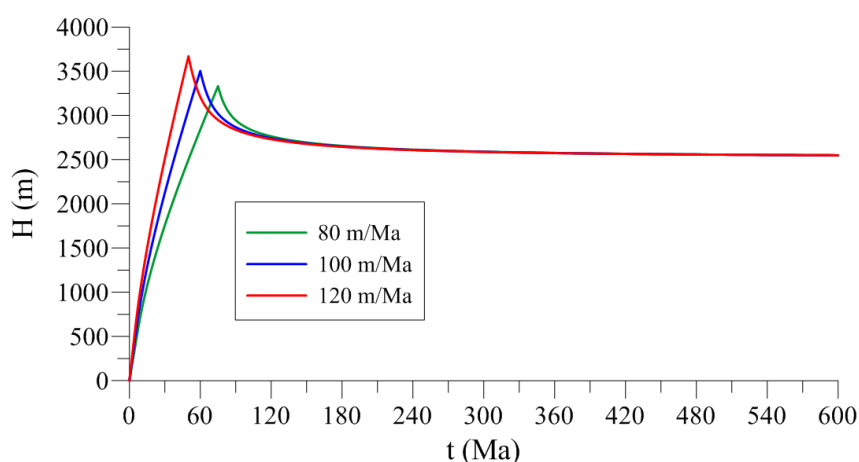


Figura 86: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes taxas de deposição sedimentar (caso 1)

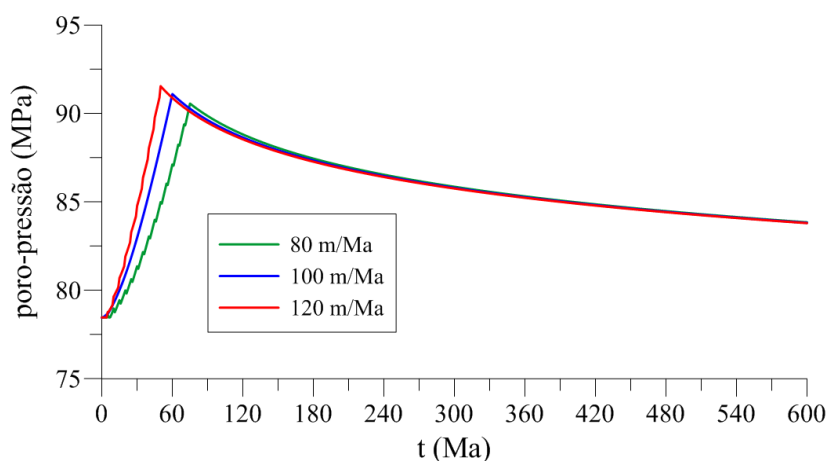


Figura 87: evolução da poro-pressão na base da bacia para diferentes taxas de deposição sedimentar (caso 1)

5.1.3.2 Permeabilidade

A segunda análise paramétrica é realizada para diferentes valores de coeficiente de permeabilidade inicial do material sedimentar, enquanto os demais parâmetros do modelo permanecem inalterados. A partir do valor estabelecido no problema original, $k_0^f = 10^{-9} \text{ MPa}^{-1}\text{m}^2\text{s}^{-1}$, adota-se um valor abaixo, $k_0^f = 0.5 \times 10^{-9} \text{ MPa}^{-1}\text{m}^2\text{s}^{-1}$, e um valor acima, $k_0^f = 2 \times 10^{-9} \text{ MPa}^{-1}\text{m}^2\text{s}^{-1}$, para investigar o impacto que a mudança do coeficiente de permeabilidade inicial tem sobre o comportamento da bacia.

As leis de compactação gravitacional ilustradas na Figura 88 indicam que, embora o grau de compactação ao fim da análise seja o mesmo, as histórias de deformação foram significativamente diferentes até aproximadamente $t = 5T_{sed} = 300 \text{ Ma}$. As curvas de evolução da poropressão na base da bacia são exibidas na Figura 89. Observa-se que as diferenças nos valores de pico se mantêm praticamente constantes ao longo de todo o processo de compactação.

As análises paramétricas realizadas demonstram a importância da permeabilidade do material depositado sobre o comportamento da bacia. Enquanto as diferentes taxas de deposição sedimentar levaram a diferenças na lei de compactação e evolução das poro-pressões durante a fase de construção da bacia, as diferentes permeabilidades consideradas levaram a estados de pressão significativamente diferentes ao longo de toda sua história de compactação. No contexto da engenharia do petróleo, por exemplo, isto pode representar mudanças nas janelas de migração de hidrocarbonetos, impactando diretamente o potencial de um reservatório.

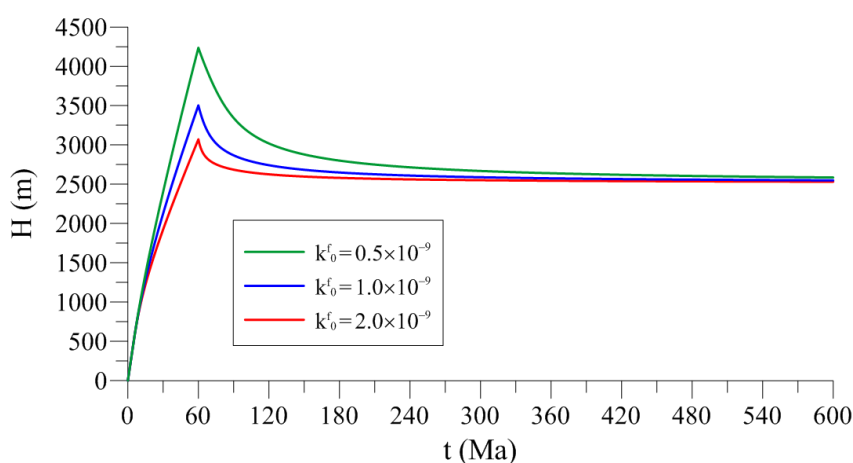


Figura 88: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes coeficientes de permeabilidade inicial (caso 1)

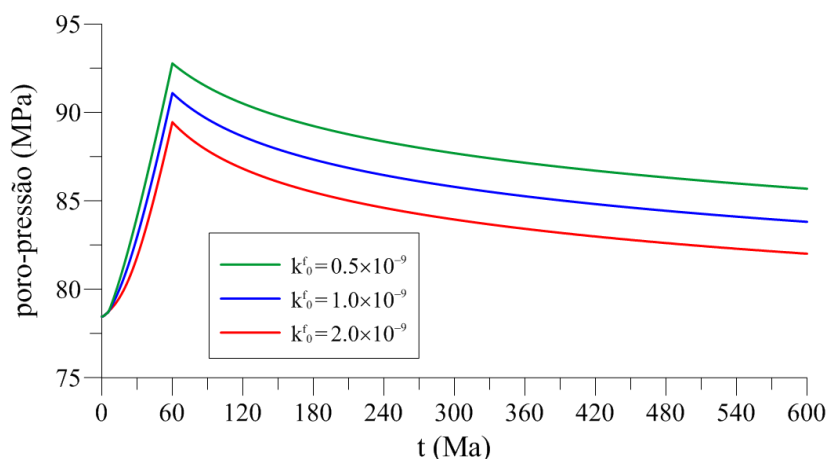


Figura 89: evolução da poro-pressão na base da bacia para diferentes coeficientes de permeabilidade inicial (caso 1)

5.2 SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS DE DEFORMAÇÃO MECÂNICA E QUÍMICO-MECÂNICA EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS

O objetivo agora é investigar a contribuição das deformações químico-mecânicas no processo de compactação gravitacional de uma bacia sedimentar em condições isotérmicas. Deve-se adotar um valor adequado para o parâmetro viscoplástico m utilizado na lei de evolução de p_{vp}^s (70) para que, sob certas condições de carregamento, o fenômeno de pressão-solução possa ocorrer no material. A Figura 20 demonstra que, para $m < 1$, existe um grau de deformação J^{ir} para o qual $p_{vp}^s(J^{ir}) \leq p_c(J^{ir})$, o que possibilita o desenvolvimento das deformações viscoplásticas na bacia. O valor adotado é o mesmo de Bruch et al. (2016), $m = 0.5$. Todos os demais dados do problema permanecem os mesmos do problema anterior. Os resultados desta análise são identificados nas legendas das figuras e tabelas como caso 2.

A Figura 90 apresenta a lei de compactação gravitacional da bacia. Pode-se ver que as deformações viscoplásticas tiveram pouco impacto sobre a curva de compactação em comparação ao caso em que foram consideradas apenas deformações mecânicas. Ao fim da fase de deposição sedimentar a bacia apresentou exatamente a mesma altura do caso 1, $H(T_{sed}) = 3484$ m. No entanto, após transcorrido o tempo total da análise, a bacia apresentou maior grau de compactação, com $H(10T_{sed}) = 2410$ m. Os valores de deformação obtidos para $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$ foram, respectivamente: 29.7%, 41.9%, 54.4% e 59.8%.

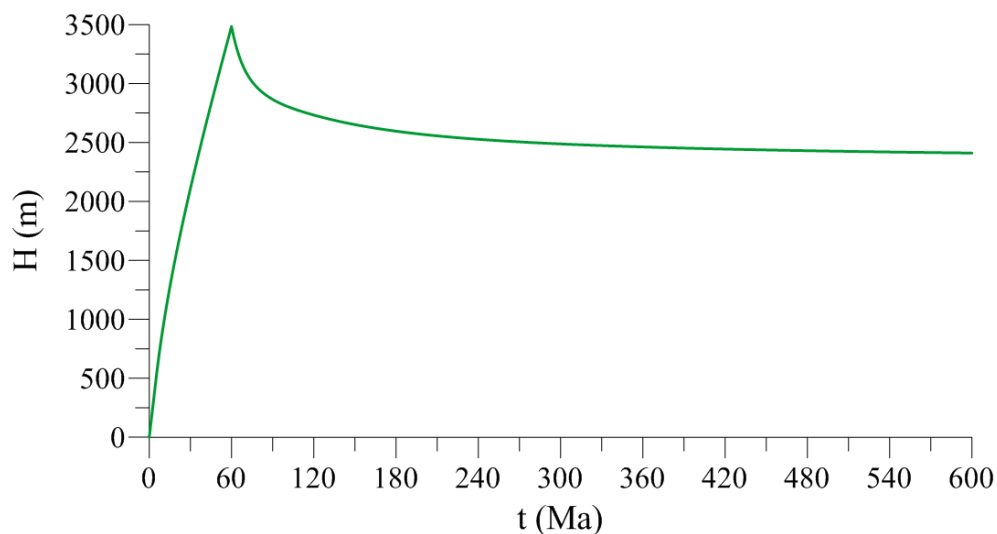


Figura 90: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 2)

Devido a ocorrência de deformações viscoplásticas, deve-se respeitar um passo de tempo mínimo δt_{\min}^{vp} associado a um passo de tempo de referência Δt_{ref}^{vp} , conforme apresentado nas equações (278) e (281). Desta forma, o passo de tempo do módulo poromecânico passa a ser controlado em função da difusão da massa fluida no meio poroso e das deformações viscoplásticas do esqueleto segundo a equação (279). A partir do valor constante adotado para η_{vp} , e dos valores atingidos para E_{oed} , constatou-se $\delta t_{\min}^{vp} \gg \delta t_{\min}^f$ ao longo de toda a análise. Isto significa que no problema proposto a difusão da massa fluida é o fenômeno que controla a evolução do passo de tempo na ferramenta numérica. Um estudo da discretização espacial e temporal foi realizado para investigar se a ocorrência das deformações viscoplásticas levaria a alguma mudança no comportamento da bacia. Observa-se que os resultados apresentados na Tabela 2 são praticamente iguais aos da Tabela 1. Sendo assim, os resultados apresentados a seguir foram obtidos com a malha de 120 elementos e $\beta^f = 10$.

Tabela 2: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 2)

Propriedades da malha			$H(t = T_{sed})$			
<i>elementos</i>	<i>nós</i>	<i>gdl</i>	$\beta^f = 0.5$	$\beta^f = 1$	$\beta^f = 5$	$\beta^f = 10$
20	248	828	3565.8	3567.7	3619.2	3719.7
30	368	1228	3531.2	3531.4	3544.7	3579.4
60	728	2428	3499.2	3499.2	3499.7	3502.8
120	1448	4828	3484.0	3484.0	3483.9	3483.9

5.2.1 Caso 2: análise local

A Figura 91 apresenta a evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia. Recordar-se que a parte irreversível do Jacobiano da transformação é obtida em função da parte plástica e viscoplástica por meio da relação $J^{ir} = J^p J^{vp}$. As curvas indicam que o regime elástico, $J^{ir} = J^p = J^{vp} = 1$, ocorre para $0 \leq t \leq t^e \approx 6$ Ma. A partir de então, o material entra no regime elasto-plástico, que caracteriza o processo de compactação puramente mecânica da bacia. Durante esta fase, toda transformação de caráter irreversível do material está atribuída unicamente às deformações plásticas e, portanto, $J^{ir} = J^p$. Esta fase dura $t^e \leq t \leq t^p \approx 11$ Ma, quando começam as deformações viscoplásticas, que representam a compactação de natureza químico-mecânica. Os processos de deformação plástica e viscoplástica ocorrem de forma simultânea e interdependente para $t^p \leq t \leq t^{vp} \approx 44$ Ma. A partir deste momento não há mais evolução plástica e o material passa do regime elasto-plástico-viscoplástico para o regime elasto-viscoplástico, no qual permanece até o fim da análise. Para $t = 600$ Ma tem-se $J^{ir} = 0.285$, que respeita o limite $J^{ir} > 1 - \phi_0 = 0.28$, correspondente ao total fechamento dos poros.

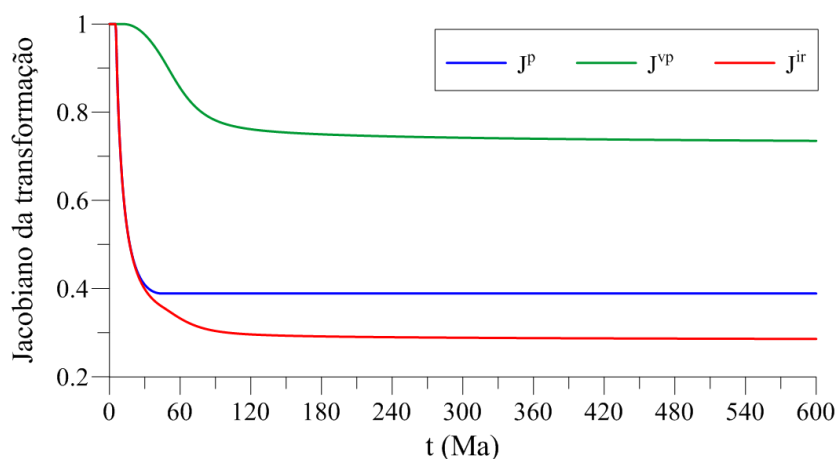


Figura 91: evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia (caso 2)

A Figura 92 ilustra as normas das taxas de deformação plástica $\left| \underline{\underline{d}}^p \right|$ e viscoplástica $\left| \underline{\underline{d}}^{vp} \right|$ ao longo da análise, onde é possível identificar de forma clara a simultaneidade dos processos de compactação mecânica e químico-mecânica entre $t^p \approx 11$ Ma e $t^{vp} \approx 44$ Ma, assim como a velocidade de ocorrência destes fenômenos. A taxa de deformação plástica apresenta um pico praticamente instantâneo em $t = 7$ Ma e decresce até zero para $t = 44$ Ma, enquanto a taxa

de deformação viscoplástica começa em $t = 11$ Ma , atinge o seu valor máximo em $t = 52$ Ma , e depois segue com velocidades cada vez menores até o fim da análise.

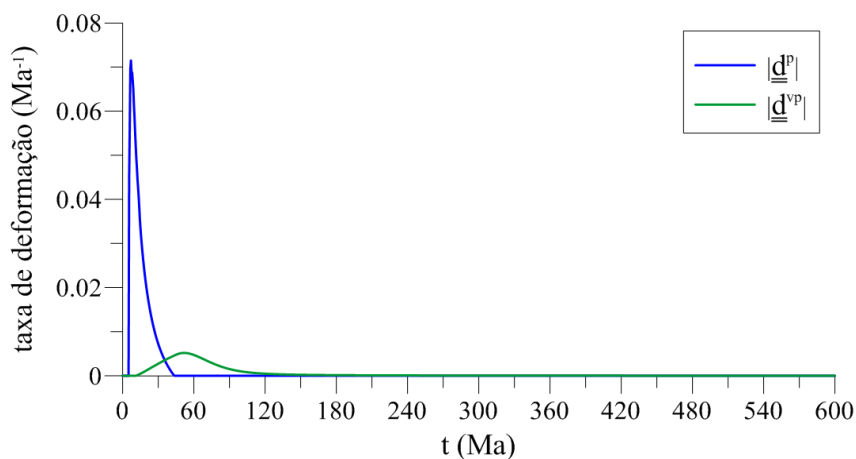


Figura 92: evolução da norma das taxas de deformação plástica e viscoplástica na base da bacia (caso 2)

A curva de evolução da porosidade na base da bacia está representada na Figura 93. A camada depositada com 72% de porosidade encontra-se com 56% ao fim do regime elasto-plástico, $t^p \approx 11$ Ma , e 22.5% ao fim do regime elasto-plástico-viscoplástico, $t^{vp} \approx 44$ Ma . Aos 30, 60, 120 e 600 milhões de anos o material apresenta 29.7%, 15.7%, 5.4% e 2%, respectivamente.

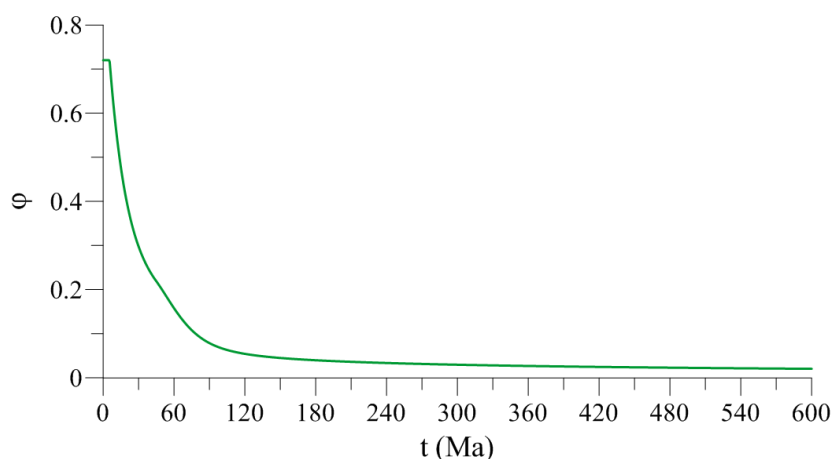


Figura 93: evolução da porosidade na base da bacia (caso 2)

A Figura 94 apresenta o histórico da poro-pressão na base da bacia. A pressão parte do valor hidrostático de 78.4 MPa em $t = 0$ e chega a 91.6 MPa ao fim da fase de deposição sedimentar, $t = 60$ Ma . Observa-se que após este período, o excesso de poro-pressão do material

continuou a aumentar, $\dot{p} > 0$. Este fenômeno não foi observado na Figura 63 para o caso em que foram consideradas apenas deformações puramente mecânicas na bacia, quando exatamente após o fim da fase de deposição dos sedimentos, a curva da poro-pressão passou a apresentar valores decrescentes, $\dot{p} < 0$. Esta mudança de comportamento pode ser melhor compreendida com a análise conjunta das curvas de tensão efetiva vertical e horizontal da Figura 95, onde pode-se identificar a ocorrência do fenômeno de relaxação das tensões efetivas após o término da fase de carregamento da bacia. Na realidade, o valor obtido neste instante para a tensão efetiva vertical na Figura 95, $\sigma'_v(t = 60 \text{ Ma}) = -8.5 \text{ MPa}$, em comparação ao valor obtido para o mesmo instante na Figura 65, $\sigma'_v(t = 60 \text{ Ma}) = -9 \text{ MPa}$, indica que o fenômeno de relaxação já está presente durante a fase de deposição sedimentar.

Os fenômenos concorrentes associados ao processo de deformação da bacia podem ser compreendidos da seguinte forma: ao mesmo tempo em que o processo de compactação mecânica ocorre por meio da expulsão do fluido contido nos poros do material resultando na dissipação do excesso de poro-pressão, a compactação químico-mecânica, que ocorre por meio do processo de pressão-solução intergranular, leva à relaxação das tensões efetivas do material, resultando no aumento da pressão no fluido. No entanto, durante a fase de deposição sedimentar, a interpretação destes processos e a velocidade em que acontecem é uma tarefa difícil, já que três fenômenos ocorrem simultaneamente: o carregamento, a dissipação das poro-pressões e a relaxação das tensões efetivas.

As curvas indicam que a relaxação é o fenômeno dominante na base da bacia até aproximadamente $T_{sed} \leq t \leq t^r \approx 136 \text{ Ma}$. Neste momento a poro-pressão atinge seu valor máximo, 92.9 MPa, associado à $\sigma'_v = -7.2 \text{ MPa}$ e $\sigma'_H = -4.8 \text{ MPa}$. Observa-se que o valor da relaxação de σ'_v entre $t = 60 \text{ Ma}$ e $t = 136 \text{ Ma}$ corresponde exatamente ao incremento de pressão no fluido para o mesmo período, o que pode ser interpretado como uma transferência do carregamento suportado pelo esqueleto sólido para o fluido.

Uma análise qualitativa pode ser feita para detectar se a dissipação da poro-pressão ou a relaxação das tensões efetivas é o mecanismo que controla a camada sedimentar em questão. O tempo característico de dissipação da poro-pressão pode ser estimado através do tempo de consolidação T_c , que é inversamente proporcional ao produto da permeabilidade pelo módulo de elasticidade oedométrico, $T_c \propto 1/k^f E_{oed}$. Por sua vez, pode-se assumir que o tempo carac-

terístico de relaxação das tensões efetivas T_r é proporcional à razão entre a viscosidade do material e seu módulo de elasticidade oedométrico, $T_r \propto \eta/E_{oed}$. Sabe-se que a diminuição da porosidade leva a um aumento moderado da rigidez do material, juntamente com uma redução significativa da sua permeabilidade, resultando na redução do valor do produto $k^f E_{oed}$. Como o coeficiente de viscosidade viscoplástica é mantido constante nesta análise, pode-se concluir que: 1) conforme a porosidade diminui, T_c aumenta e T_r diminui; 2) o fenômeno da relaxação predomina logo após o fim da deposição dos sedimentos $T_{sed} \leq t \leq t^r$; 3) a dissipação da poro-pressão passa a ser o fenômeno dominante após $t > t^r$.

Ao fim da análise, $t = 600$ Ma, o valor obtido para as tensões efetivas na base da bacia é de $\sigma'_v = -7.9$ MPa e $\sigma'_H = -5.2$ MPa, e o valor da pressão é de 92.2 MPa. Portanto, para $t = 10T_{sed}$ o excesso de poro-pressão nesta camada é de 13.8 MPa, em contraste aos 5.4 MPa apresentados na Figura 63. Isso reafirma a importância de utilizar modelos constitutivos adequados para o material sedimentar, que sejam capazes de reproduzir adequadamente os diferentes fenômenos envolvidos durante o processo de compactação da bacia. O ato de não considerar as deformações químico-mecânicas associadas a mecanismos de pressão-solução intergranular nos modelos computacionais podem levar à subestimação do estado de pressão nas bacias, que no contexto da engenharia de petróleo pode resultar em problemas associados à perfuração do poço, podendo levá-lo ao colapso e a subsequente falha de operação.

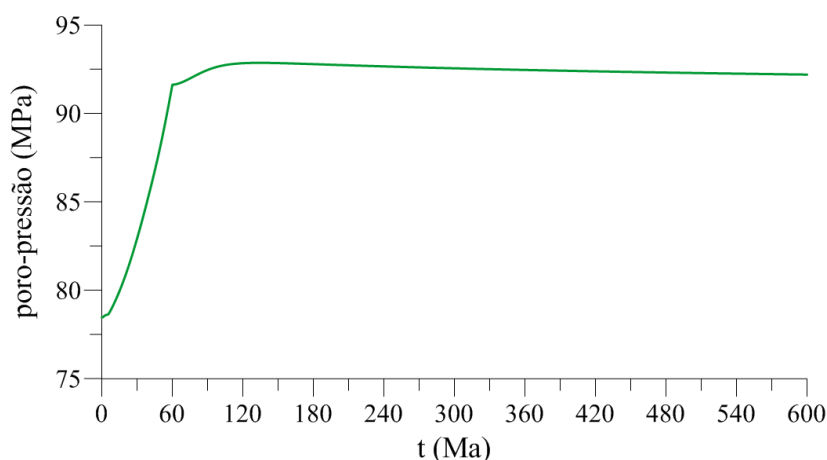


Figura 94: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 2)

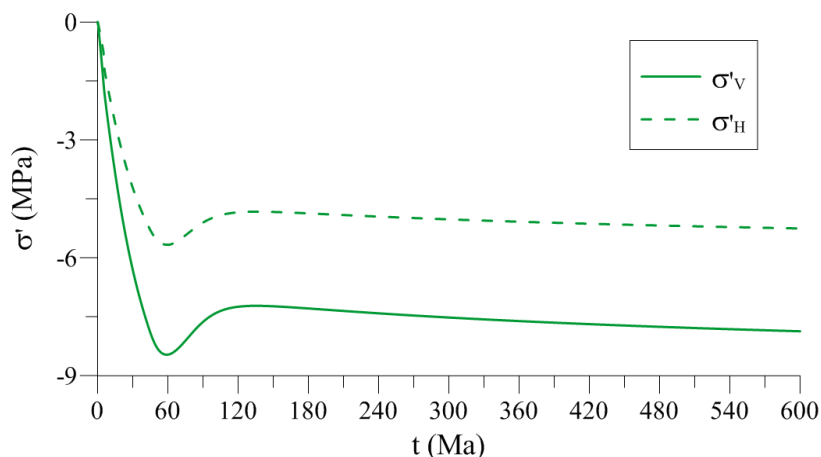


Figura 95: evolução das tensões efetivas na base da bacia (caso 2)

A Figura 96 exibe a curva de evolução do coeficiente de empuxo lateral K_0 . Pode-se verificar que os valores obtidos permaneceram constantes $K_0 = 0.67$ para $t \geq t^e \approx 6$ Ma. Estes foram os mesmos valores obtidos na análise anterior, onde não foi considerado o comportamento viscoplástico no modelo constitutivo do material sedimentar.

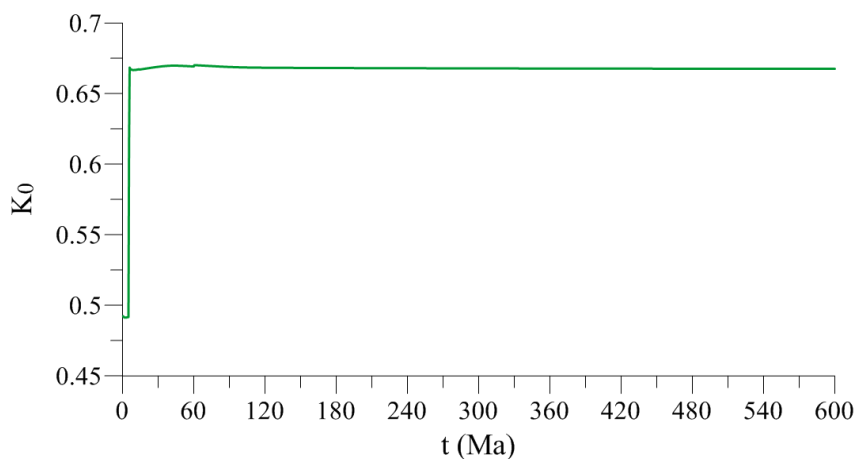


Figura 96: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 2)

A trajetória da tensão efetiva média e da tensão desviadora da primeira camada de sedimentos depositada na bacia está representada na Figura 97 para $0 \leq t \leq 60$ Ma, na Figura 98 para $60 \leq t \leq 136$ Ma e na Figura 99 para $136 \leq t \leq 600$ Ma. Estas figuras permitem visualizar, no espaço das tensões efetivas, a transição do material poro-elasto-visco-plástico entre os diferentes regimes de deformação, assim como a evolução da trajetória ao longo dos períodos em que dominam os fenômenos de relaxação ou dissipação de excesso de poro-pressão.

Pode-se descrever a evolução da Figura 97 em quatro etapas: 1) a trajetória sai da origem com inclinação de 37.5° em relação ao eixo horizontal até encontrar a superfície plástica inicial $f^p(t=0)=0$ definida por $p_{c0}=1.5$ MPa. Este caminho corresponde ao intervalo $0 \leq t \leq t^e \approx 6$ Ma. Observa-se que no instante $t=t^e$ o estado de tensão efetiva do material permanece dentro da superfície estática viscoplástica inicial $f_s^{vp}(t=0)=0$ definida por $p_{vp0}^s=2.0$ MPa; 2) na transição do regime elástico para o regime plástico, a trajetória caminha sobre a superfície plástica e continua sua evolução com inclinação de 22.9° em relação ao eixo horizontal. Lembrando que as leis de evolução de p_c e p_{vp}^s são descritas em função de $J^{ir} = J^p J^{vp}$, ambas as superfícies plástica e viscoplástica evoluem ao longo do regime plástico, mas com diferentes velocidades devido ao parâmetro m da lei (70). O regime plástico dura $t^e \leq t \leq t^p \approx 11$ Ma, quando se obtém $p_c = p_{vp}^s$ e, portanto, as superfícies plástica e viscoplástica coincidem; 3) a partir de $t=t^p$ passam a ocorrer simultaneamente deformações plásticas e viscoplásticas. O estado de tensão evolui posicionado sobre a superfície plástica, ao mesmo tempo em que se encontra fora da superfície viscoplástica. Este regime segue ao longo de $t^p \leq t \leq t^{vp} \approx 44$ Ma; 4) a partir de $t=t^{vp}$ a superfície plástica $f^p=0$ passa a evoluir mais rápido que a trajetória das tensões efetivas. Desta forma, o estado de tensão do material permanece dentro da superfície plástica, mas fora da superfície viscoplástica, e o material segue em regime de deformação viscoplástica.

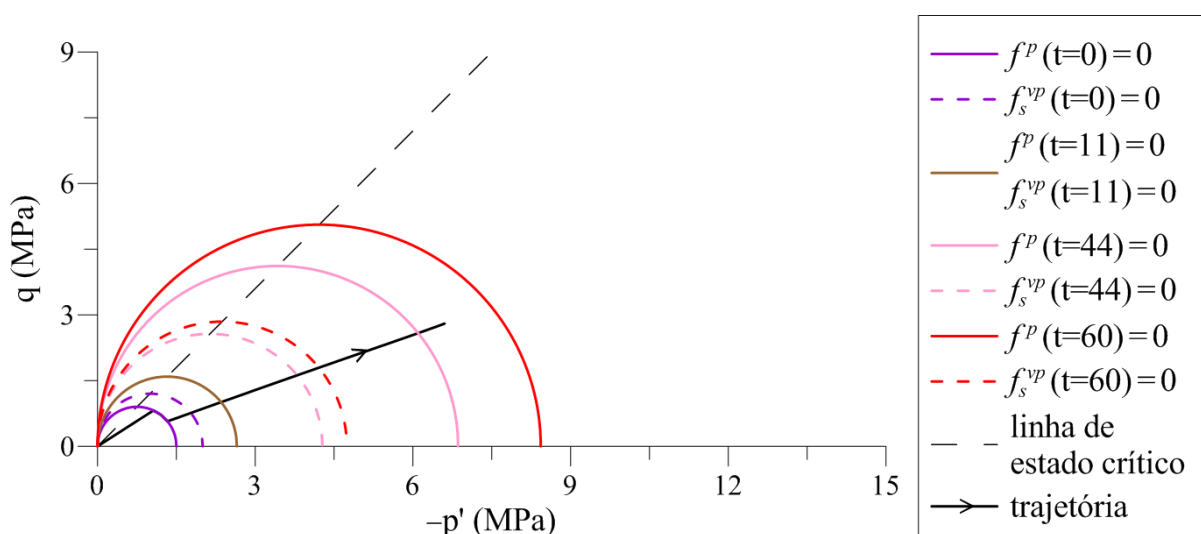


Figura 97: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=0$ e $t=60$ Ma (caso 2)

A Figura 98 descreve a evolução da trajetória da tensão efetiva média e da tensão desviadora ao longo da fase de relaxação $T_{sed} \leq t \leq t^r$. Ao longo de todo este período, o estado de tensão efetiva permanece dentro da superfície plástica e fora da superfície viscoplástica do material. Conforme as deformações viscoplásticas avançam, as tensões efetivas relaxam ao mesmo tempo em que a superfície viscoplástica $f_s^{vp} = 0$ aumenta em função de p_{vp}^s . O período de relaxação vai até $t^r \approx 136$ Ma. Observa-se que neste instante, o estado de tensão efetiva do material encontra-se bem próximo a superfície viscoplástica $f_s^{vp}(t = 136 \text{ Ma}) = 0$.

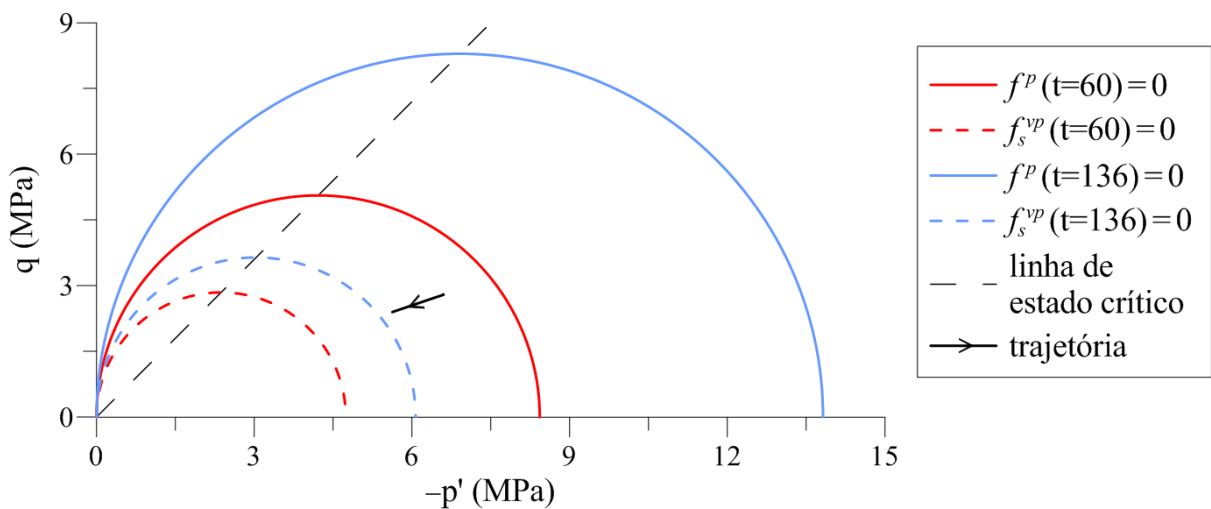


Figura 98: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=60$ e $t=136$ Ma (caso 2)

A partir de $t = t^r$, o processo de dissipação do excesso de poro-pressão passa a ser dominante em relação ao fenômeno de relaxação na base da bacia, e a trajetória das tensões efetivas passa a evoluir novamente no sentido positivo dos eixos $-p'$ e q , como mostra a Figura 99. As deformações viscoplásticas do material seguem até o fim da análise, $t = 600$ Ma. Neste momento o estado de tensões efetivas encontra-se sobre a superfície viscoplástica $f_s^{vp}(t = 600 \text{ Ma}) = 0$. Nota-se que para $t > t^e$, a inclinação da trajetória permaneceu constante, com 22.9° em relação ao eixo horizontal. Este foi o mesmo valor obtido na análise elasto-plástica anterior, apresentada na Figura 67.

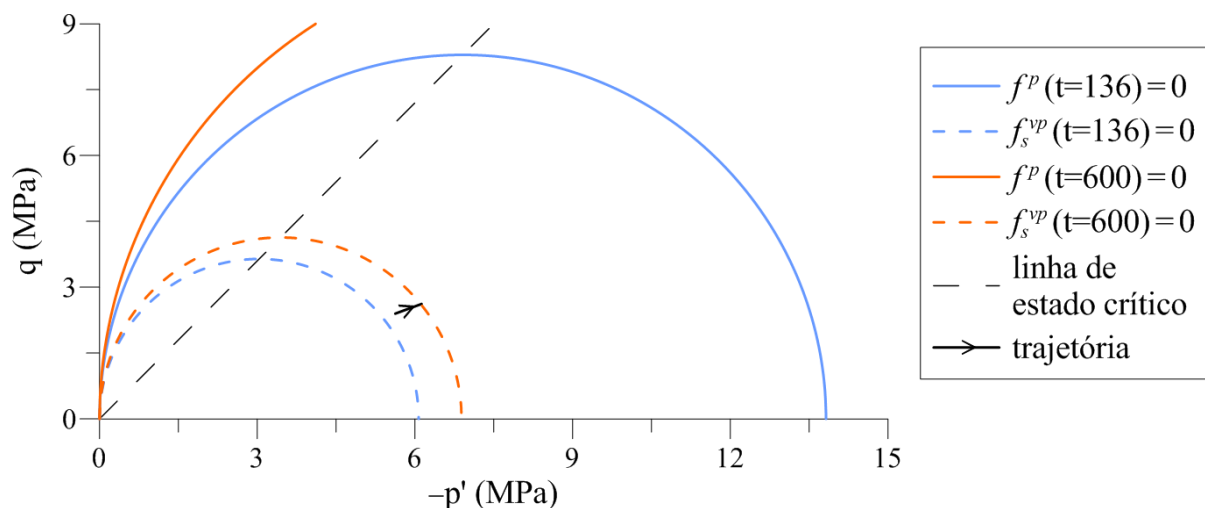


Figura 99: trajetória da tensão efetiva média e tensão desviadora na base da bacia entre $t=136$ e $t=600$ Ma (caso 2)

A Figura 100 ilustra os valores obtidos para a pressão de consolidação plástica p_c , e viscoplástica p_{vp}^s na base da bacia. Pode-se ver claramente a influência do valor adotado para o parâmetro $m=0.5$ sobre o comportamento do material. Este parâmetro controla a velocidade de evolução de p_{vp}^s em função de J^{ir} , e permite ao modelo constitutivo representar a ordem cronológica dos fenômenos de deformação observados ao longo do processo de diagênese das rochas sedimentares. A partir dos valores iniciais adotados para p_c e p_{vp}^s , o parâmetro m permite calibrar o momento da transição do regime plástico para o regime plástico-viscoplástico, de acordo com o material desejado. Para o caso simulado, isto ocorre em $t = t^p \approx 11$ Ma, instante em que as curvas se interceptam no gráfico.

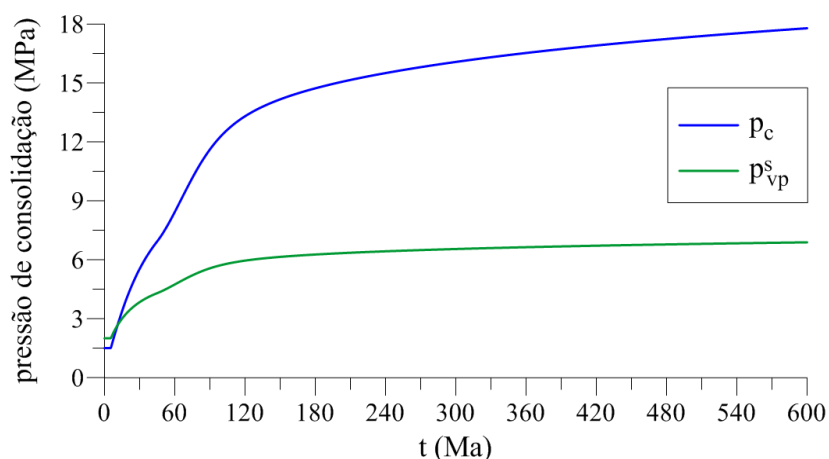


Figura 100: evolução da pressão de consolidação na base da bacia (caso 2)

A Figura 101 apresenta a evolução do passo de tempo de referência de difusão da massa líquida Δt_{ref}^f , e do passo de tempo de referência viscoplástico Δt_{ref}^{vp} na base da bacia, calculados de acordo com as expressões (275) e (278), respectivamente. Observa-se a grande diferença entre os valores iniciais $\Delta t_{ref}^{vp} = 674925.4$ anos e $\Delta t_{ref}^f = 52.1$ anos. Conforme o material deforma e a porosidade diminui, Δt_{ref}^{vp} diminui e Δt_{ref}^f aumenta, atingindo ao fim da análise, $t = 600$ Ma, $\Delta t_{ref}^{vp} = 23318.8$ anos e $\Delta t_{ref}^f = 24163.8$ anos. No entanto, isso não significa que o fenômeno da viscoplasticidade passe a controlar o passo de tempo δt , já que este é calculado a parte do menor valor obtido para Δt_{ref}^{vp} e Δt_{ref}^f dentre todos os elementos da bacia.

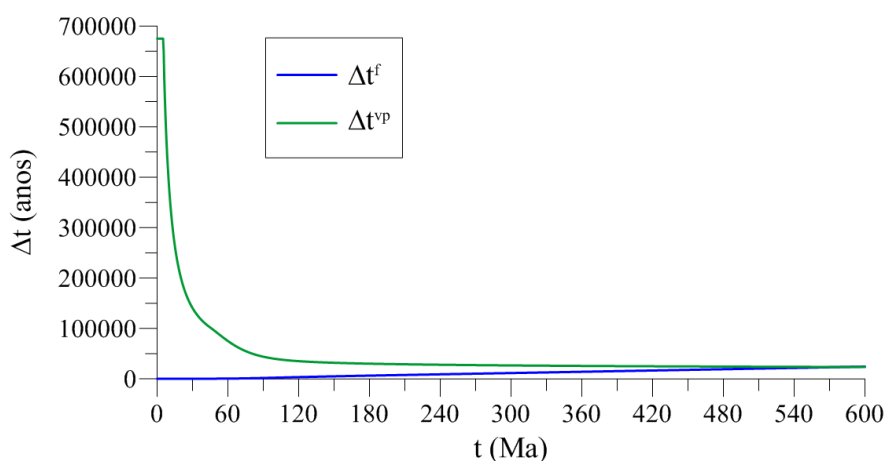


Figura 101: evolução dos passos de tempo Δt_{ref} na base da bacia (caso 2)

5.2.2 Caso 2: análise global

A análise global é realizada para $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$, que correspondem, respectivamente, a 30, 60, 120 e 600 milhões de anos de idade da bacia. A Figura 102 apresenta os perfis de Jacobiano irreversível na bacia. Todas as configurações apresentam uma camada de sedimentos no topo da bacia que permaneceu no regime elástico, $J^{ir} = 1$. O comportamento apresentado nas curvas da Figura 102 para $J^{ir} = J^p J^{vp}$ foram muito semelhantes aos resultados da Figura 76 para $J^p = J^{ir}$, no caso em que foram considerados apenas os efeitos da plasticidade na bacia, isto é, apenas processos de compactação puramente mecânica.

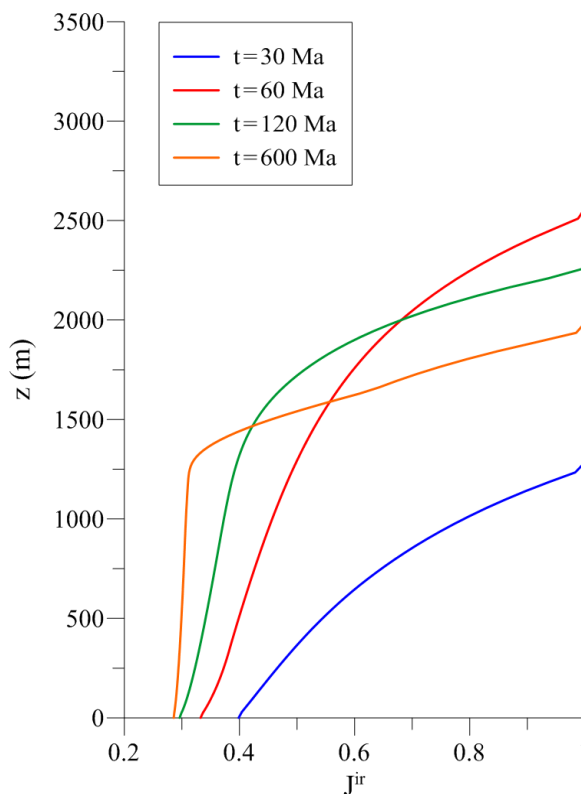


Figura 102: perfil de Jacobiano irreversível na bacia (caso 2)

A Figura 103 ilustra os perfis de Jacobiano plástico e viscoplástico. As curvas de J^p e J^{vp} para as diferentes idades da bacia demonstram a capacidade do modelo constitutivo e da ferramenta computacional de representar os fenômenos que são observados na natureza, onde as deformações puramente mecânicas são capazes de compactar o material apenas até certa porosidade, a partir da qual o processo de compactação ocorre devido às deformações químico-mecânicas. As figuras também permitem identificar as zonas em que ambos os processos ocorrem de forma interdependente, como na camada inferior de aproximadamente 1250 metros entre $t = 30$ Ma e $t = 60$ Ma, em que fica clara a existência simultânea destes fenômenos.

Observa-se na curva de J^{vp} para $t = 30$ Ma que as deformações viscoplásticas praticamente não se desenvolveram na bacia, com exceção de uma pequena camada com aproximadamente 250 metros de espessura localizada na sua base, enquanto que para $t = 60$ Ma a compactação químico-mecânica atua ao longo de uma camada de 1250 metros e para $t = 120$ Ma ao longo de aproximadamente 2000 metros. É interessante notar que para $t = 600$ Ma, o valor mínimo de J^{vp} não ocorre na base da bacia, e sim para uma camada localizada em $z \approx 1250$ m. Isto é atribuído à trajetória de tensões efetivas, associada ao carregamento e aos fenômenos de relaxação e dissipação de poro-pressão ao longo da história da bacia.

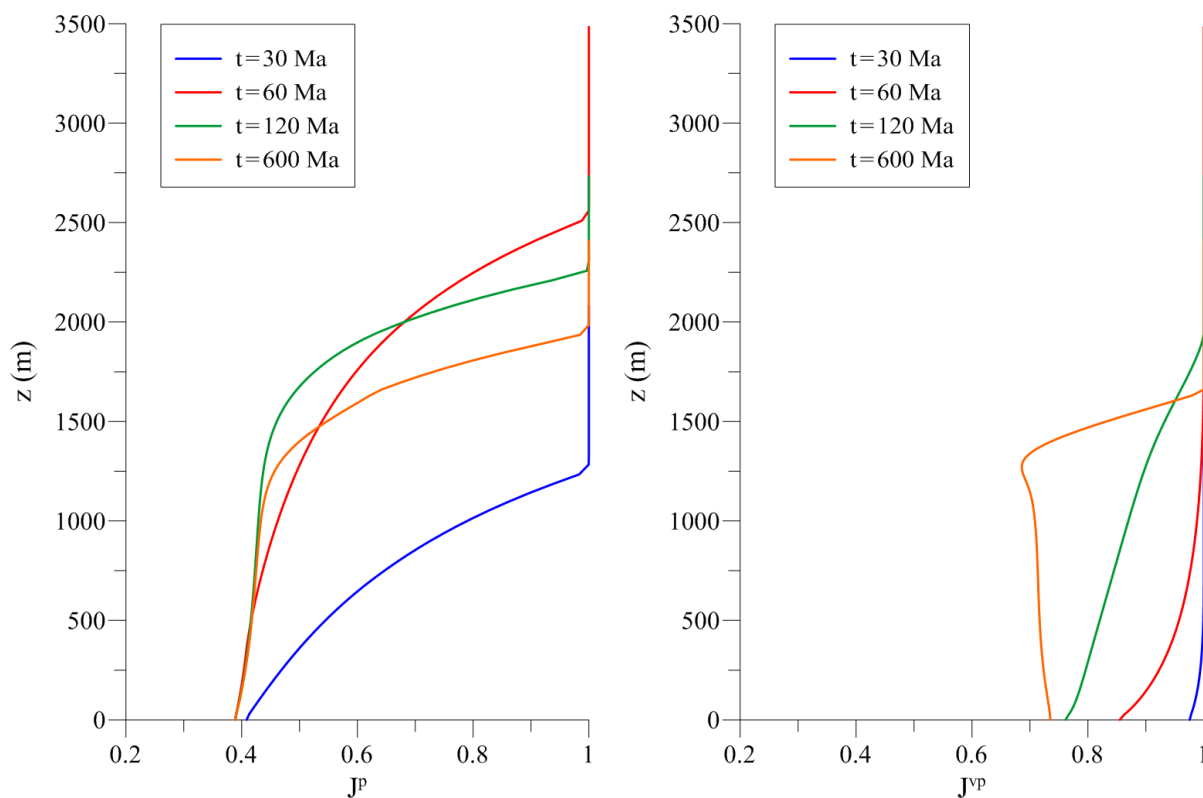


Figura 103: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia (caso 2)

A Figura 104 apresenta os perfis de porosidade da bacia, calculada em função de J^{ir} . As camadas que mantiveram o valor inicial, $\phi_0 = 0.72$, correspondem às regiões que permaneceram no regime elástico de deformação. Observa-se que ao fim da análise, $t = 600$ Ma, a região inferior da bacia com aproximadamente 1250 metros de espessura apresenta porosidade abaixo de 10%, chegando a 2% na base, valor que corresponde a uma deformação volumétrica de $\Delta V/V = 1 - J \approx 1 - J^{ir}$ de 71.4% do material sedimentar.

Os perfis de poro-pressão e de tensão efetiva média na bacia estão apresentados na Figura 105 e Figura 106, respectivamente. Analisando a evolução das configurações obtidas para 60, 120 e 600 milhões de anos, é possível identificar claramente os efeitos da relaxação nas camadas inferiores localizadas entre a base da bacia e $z \approx 500$ m. Em comparação com a Figura 78, pode-se notar que para todas as camadas em que houve compactação por mecanismos de pressão-solução, o excesso de poro-pressão resultante foi muito maior. Isto também ocorre para a tensão efetiva média, em comparação com a Figura 80.

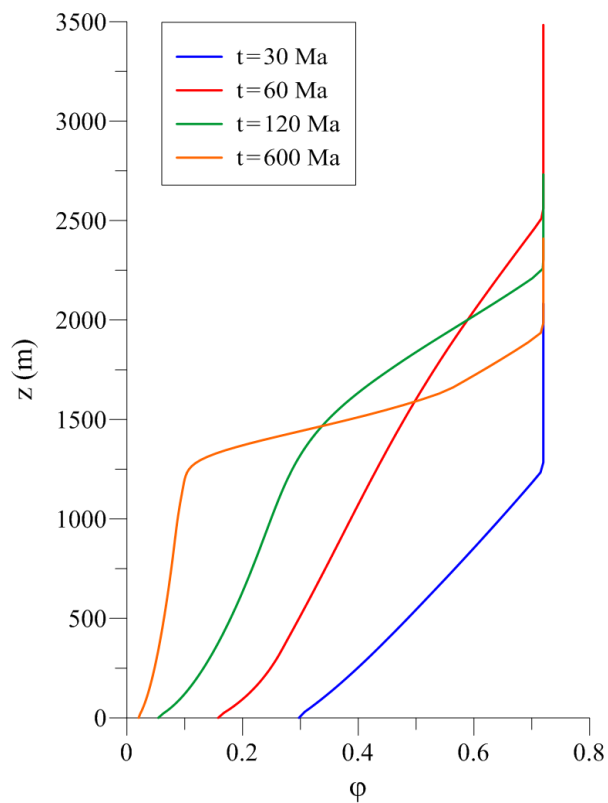


Figura 104: perfil de porosidade na bacia (caso 2)

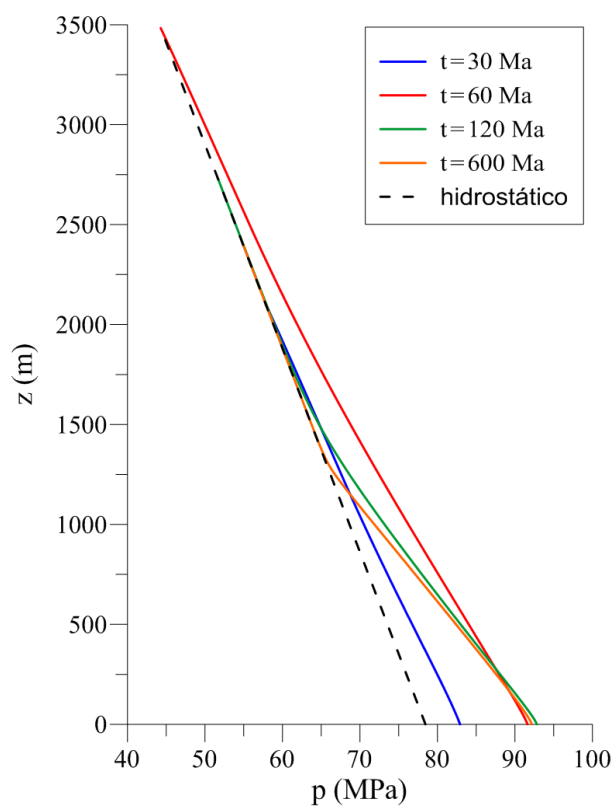


Figura 105: perfil de poro-pressão na bacia (caso 2)

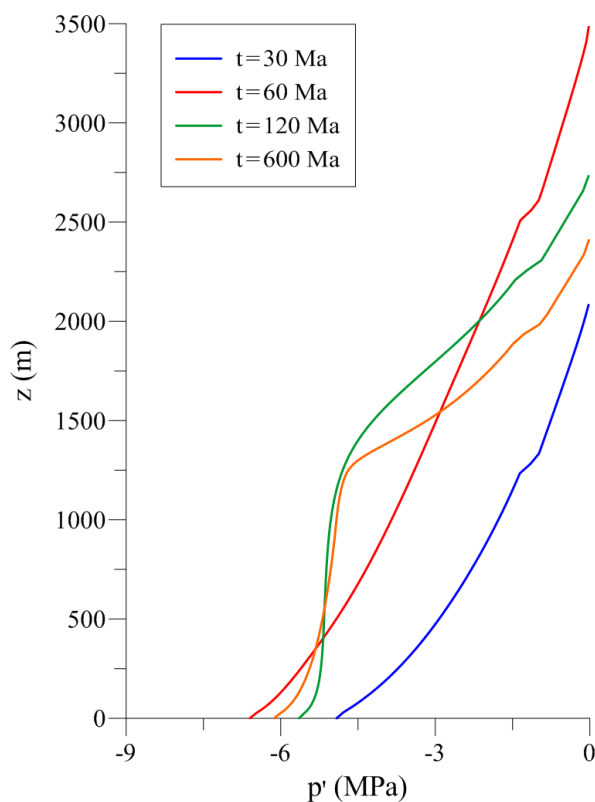


Figura 106: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 2)

A Figura 107 mostra a curva da tensão efetiva horizontal média Σ'_H que atua nas laterais da bacia para mantê-la em condições oedométricas ao longo do processo de compactação gravitacional. Em comparação ao caso anterior, onde não foi considerado o comportamento viscoplástico, os valores obtidos até o fim da fase de deposição são muito próximos. No entanto, a relaxação das tensões efetivas que ocorre na bacia faz com que a curva se estabilize com valores próximos a 3 MPa, enquanto que na Figura 83 a curva atinge 4.9 MPa para $t = 600$ Ma.

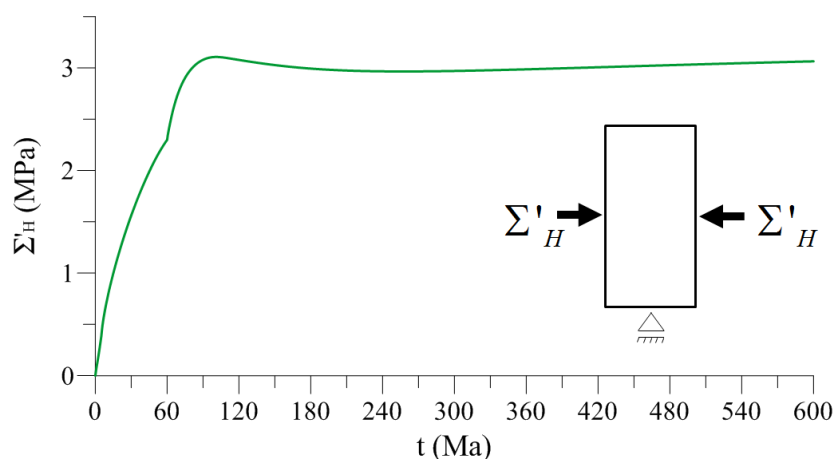


Figura 107: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 2)

A Figura 108 ilustra a evolução do passo de tempo mínimo δt_{\min}^f referente à difusão da massa fluida no meio poroso, fornecido pela equação (280), e a Figura 109 apresenta a evolução do passo de tempo mínimo δt_{\min}^{vp} referente às deformações viscoplásticas do esqueleto, fornecido pela expressão (281). Estes valores são obtidos por meio de uma varredura em todos os elementos da malha da bacia, que busca os menores passos de tempo Δt_{ref}^f e Δt_{ref}^{vp} , definidos pelas expressões (275) e (278), respectivamente.

Na análise anterior foi demonstrado que o passo de tempo δt_{\min}^f é controlado pelos elementos da região elástica localizada nas camadas superiores da bacia e que fornecem os menores valores para Δt_{ref}^f . Isto ocorre pelo fato de permanecerem as camadas mais permeáveis ao longo da análise. Desta forma, a curva da Figura 108 ficou exatamente igual à curva da Figura 85.

Em relação ao passo de tempo δt_{\min}^{vp} constatou-se o contrário, e os menores valores de Δt_{ref}^{vp} foram fornecidos pelo elemento localizado na base da bacia, onde se obteve o maior grau de deformação. Conforme o material deforma e a porosidade diminui, o módulo de elasticidade oedométrico aumenta, e como a viscosidade é constante, Δt_{ref}^{vp} diminui. Assim, a curva da Figura 109 ficou exatamente igual à curva de Δt_{ref}^{vp} na Figura 101. A Figura 108 e a Figura 109 demonstram que, ao longo de toda a análise, $\delta t_{\min}^f \ll \delta t_{\min}^{vp}$ e, portanto, a difusão da massa fluida é o fenômeno que controla a evolução do passo de tempo na ferramenta computacional.

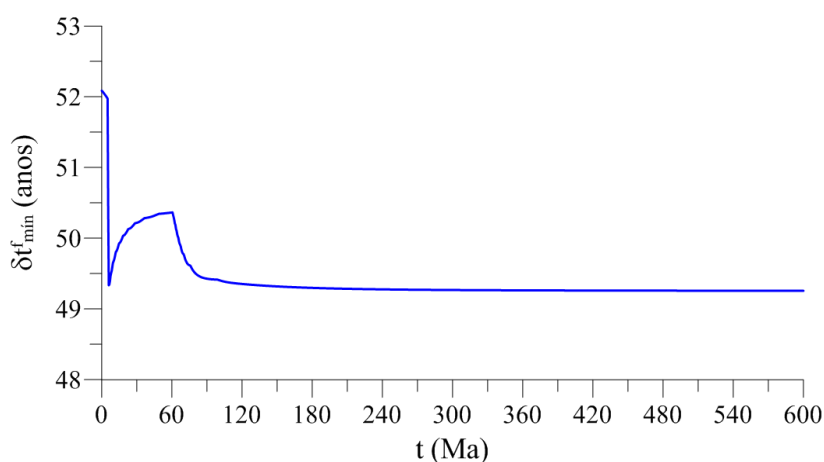


Figura 108: evolução do passo de tempo δt_{\min}^f ao longo da análise (caso 2)

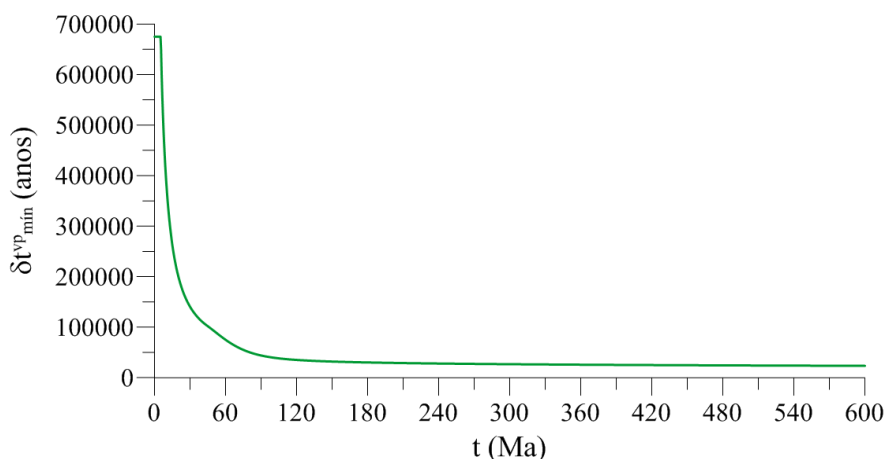


Figura 109: evolução do passo de tempo δt_{\min}^{vp} ao longo da análise (caso 2)

5.2.3 Caso 2: análise paramétrica

As análises paramétricas foram realizadas com malhas de 60 elementos regularmente distribuídos ao longo da espessura da bacia e $\beta^f = 10$.

5.2.3.1 Parâmetro m

Para estudar o efeito do parâmetro m sobre o comportamento do modelo constitutivo do material sedimentar adotou-se, além do valor $m = 0.5$, os valores $m = 0.3$ e $m = 0.7$. Os demais dados do problema permanecem iguais. Os resultados apresentados referem-se à primeira camada que foi depositada na base da bacia. A evolução de p_{vp}^s e $\left| \underline{d}^{vp} \right|$ estão apresentadas na Figura 110 e na Figura 111, respectivamente.

Sabe-se que o parâmetro m controla a taxa de evolução de p_{vp}^s , que controla o tamanho da superfície estática viscoplástica $f_s^{vp} = 0$. Portanto, como $p_{vp0}^s > p_{c0}$, e de acordo com as leis de encruamento plástica (58) e viscoplástica (70), o parâmetro m permite controlar para qual grau de deformação irreversível, $J^{ir} = J^p J^{vp}$, o material apresentará $p_{vp}^s = p_c$. Esta configuração corresponde à transição do regime plástico para o regime plástico-viscoplástico, caracterizado pelo início das deformações viscoplásticas do material.

A Figura 110 demonstra que, quanto menor o valor de m , menor será a taxa de variação de p_{vp}^s e, portanto, mais lenta será a evolução da superfície $f_s^{vp} = 0$. Desta forma, durante a fase de deposição sedimentar da bacia, quanto menor o valor de m , mais longe o estado de tensão estará desta superfície. Isto implica em maiores taxas de deformação viscoplástica, como pode ser visto na Figura 111. Observa-se também que, além de diferentes valores, os picos de deformação viscoplástica ocorreram para diferentes instantes de tempo. As curvas indicam que para $m = 0.3$, $m = 0.5$ e $m = 0.7$, o início das deformações viscoplásticas na base da bacia ocorre para $t^p \approx 9$ Ma, $t^p \approx 11$ Ma e $t^p \approx 18$ Ma, respectivamente.

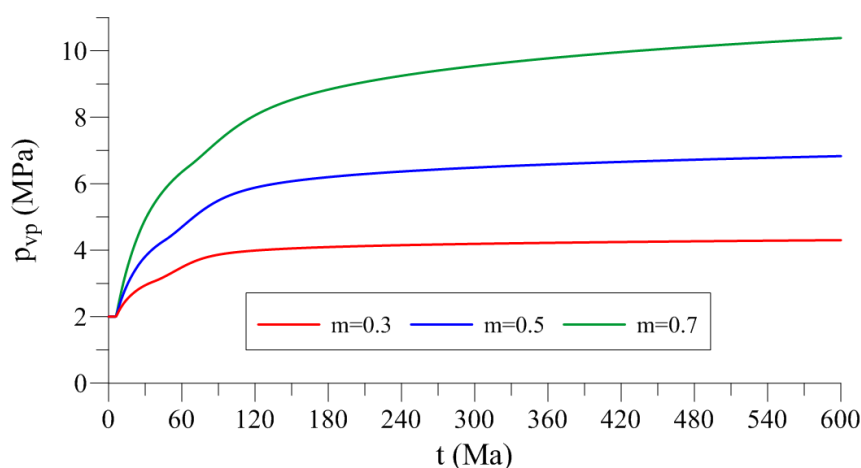


Figura 110: evolução da pressão de consolidação viscoplástica para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)

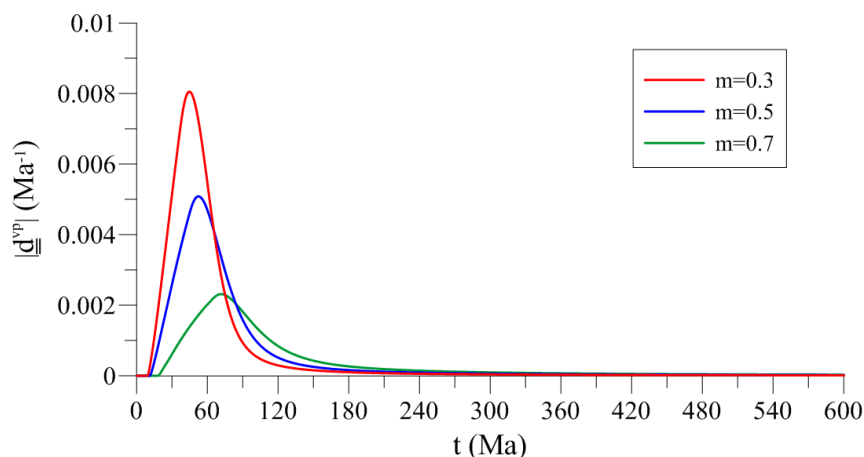


Figura 111: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)

A evolução de J^{vp} , J^p e J^{ir} estão apresentadas na Figura 112, Figura 113 e Figura 114, respectivamente. Observa-se que, quanto menor o valor de m , menor o valor de J^{vp} e maior o valor de J^p , ou seja, maior o grau de deformação viscoplástica e menor o grau de deformação plástica. Por outro lado, as curvas da Figura 114 apresentam valores muito próximos de $J^{ir} = J^p J^{vp}$ na base da bacia, o que significa que a deformação irreversível total é praticamente a mesma para todos os casos. Portanto, o parâmetro m permite ajustar a proporção entre as deformações puramente mecânicas e as deformações químico-mecânicas no modelo constitutivo do material sedimentar, o que pode ser muito útil para calibrar o comportamento de um material desejado a partir de dados experimentais.

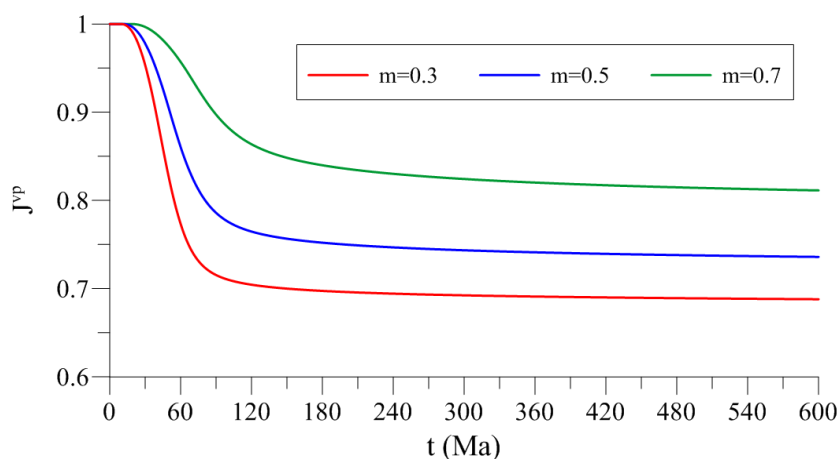


Figura 112: evolução do Jacobiano viscoplástico na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)

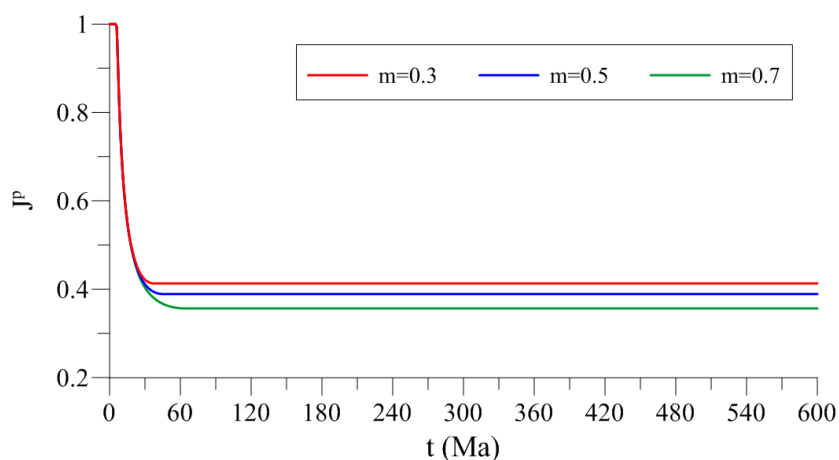


Figura 113: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)

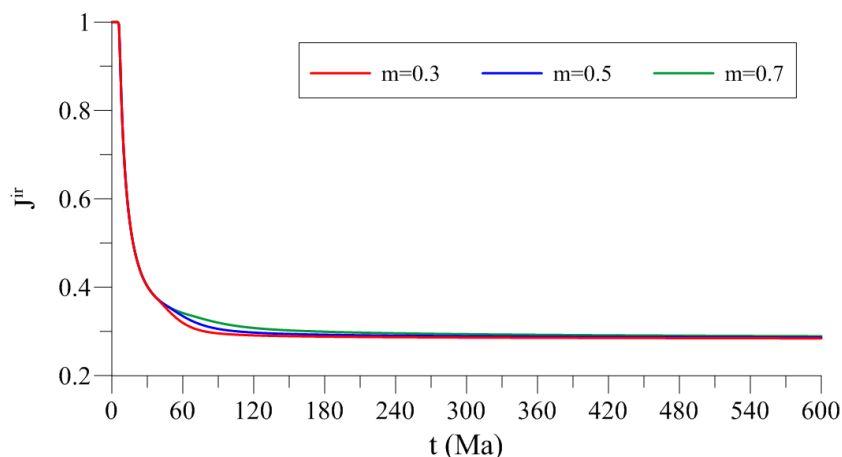


Figura 114: evolução do Jacobiano irreversível na base da bacia para diferentes valores do parâmetro m (caso 2)

5.2.3.2 Expoente n

A regra de fluxo viscoplástico descrita em (66) indica que a função do expoente n é de majorar ou minorar a função de escala $\Phi(F)$ definida em (65), que controla a magnitude da taxa de deformação viscoplastica $\underline{\underline{d}}^{vp}$. O estudo do expoente n é realizado para, além do valor $n = 1.0$, os valores $n = 0.8$ e $n = 1.2$. Os demais dados do problema permanecem inalterados.

A evolução de p_{vp}^s e $|\underline{\underline{d}}^{vp}|$ na base da bacia estão apresentadas na Figura 115 e Figura 116, respectivamente. Pode-se observar que os picos de $\underline{\underline{d}}^{vp}$ ocorreram no mesmo instante para todos os casos, $t^p \approx 11$ Ma, mas com valores diferentes. Apesar de controlar a intensidade da taxa de deformação viscoplástica, os resultados obtidos para os diferentes valores do expoente n não apresentaram impacto significativo sobre a evolução de p_{vp}^s , embora este seja função das deformações viscoplásticas através de $J^{ir} = J^p J^{vp}$.

As curvas de J^{vp} , J^p e J^{ir} respectivamente ilustradas na Figura 117, Figura 118 e Figura 119 demonstraram pouca sensibilidade em relação aos valores adotados para investigar a influência do expoente n . Os resultados indicam que quanto menor o valor de n , maior a taxa de deformação viscoplástica. Como as curvas de J^{ir} permaneceram praticamente iguais, quanto menor o valor de n , menor o valor de J^{vp} e maior o valor de J^p .

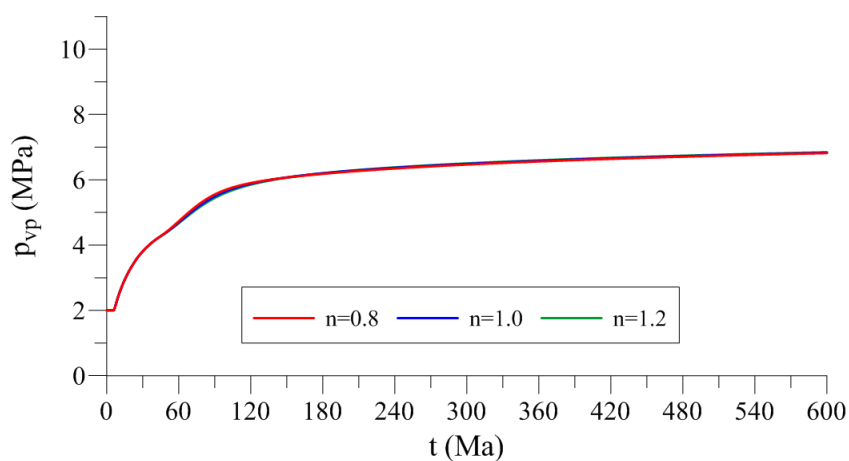


Figura 115: evolução da pressão de consolidação viscoplástica para diferentes valores do expoente n (caso 2)

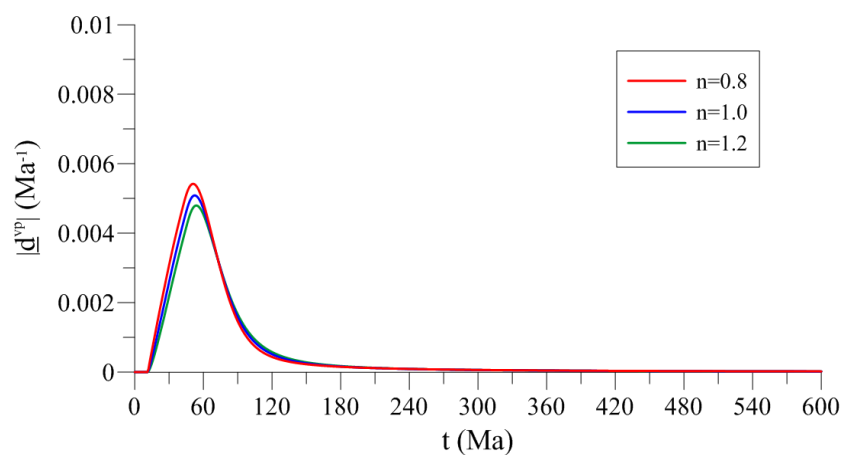


Figura 116: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica para diferentes valores do expoente n (caso 2)

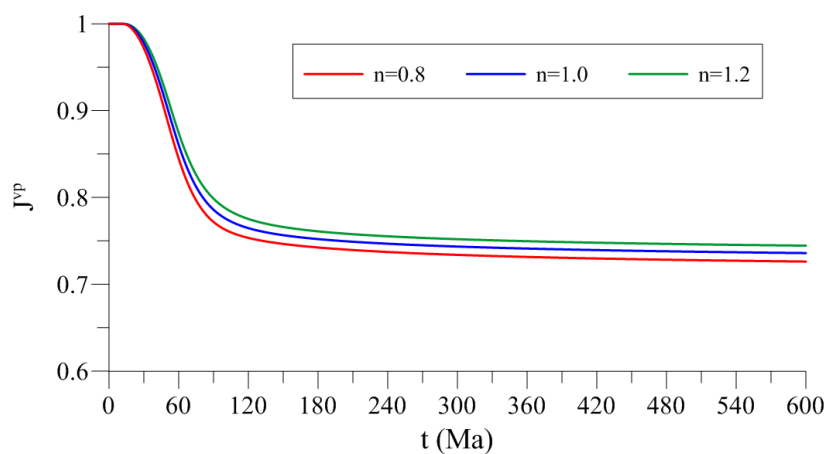


Figura 117: evolução do Jacobiano viscoplástico na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2)

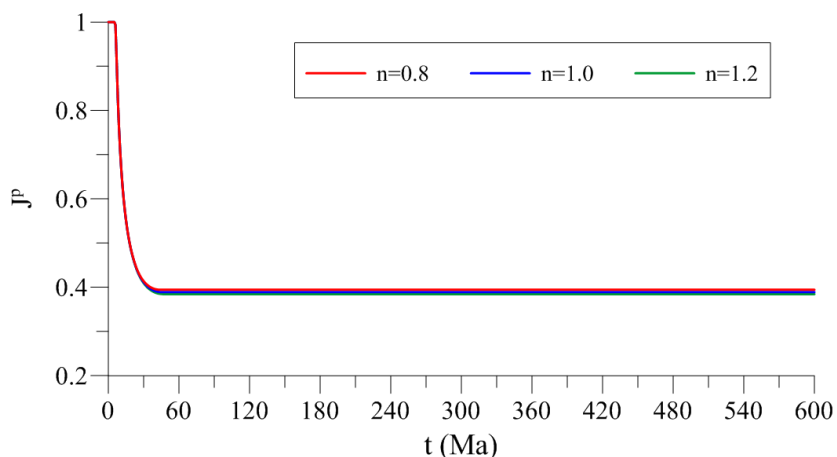


Figura 118: evolução do Jacobiano plástico na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2)

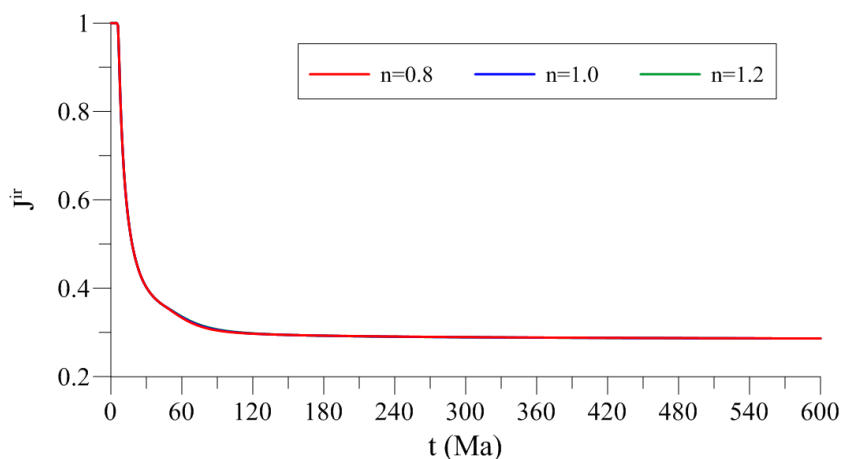


Figura 119: evolução do Jacobiano irreversível na base da bacia para diferentes valores do expoente n (caso 2)

As análises paramétricas realizadas para m e n demonstraram como é possível calibrar o comportamento viscoplástico no modelo constitutivo do material sedimentar. Enquanto o expoente n permite alterar a magnitude da taxa de deformação viscoplástica, o parâmetro m permite calibrar a taxa de evolução de p_{vp}^s , o intervalo de ocorrência do regime plástico-viscoplástico, e também a magnitude das deformações viscoplásticas. Os resultados indicam que, para o intervalo de valores investigados, o expoente n tem pouca influência no comportamento global da bacia, enquanto que o impacto da variação do parâmetro m é significativo.

6 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS COM EFEITOS DA TEMPERATURA

Este capítulo apresenta simulações numéricas de bacias sedimentares com efeitos da temperatura. O programa acoplado termoporomecânico segue o fluxograma apresentado na Figura 52.

6.1 PROBLEMA UNIDIMENSIONAL

O problema proposto no capítulo 5 é analisado em condições não-isotérmicas. A geometria e as condições de contorno do problema térmico estão apresentadas na Figura 120 e nas expressões (336) a (339), onde $z = H(t)$ representa o topo da camada de sedimentos no instante t . A temperatura prescrita no topo da bacia e o fluxo térmico ascendente na sua base são considerados constantes ao longo de todo o período da análise. Todas as características poromecânicas do problema original permanecem inalteradas. Para facilitar a organização dos resultados, este estudo é identificado nas figuras e tabelas como caso 3.

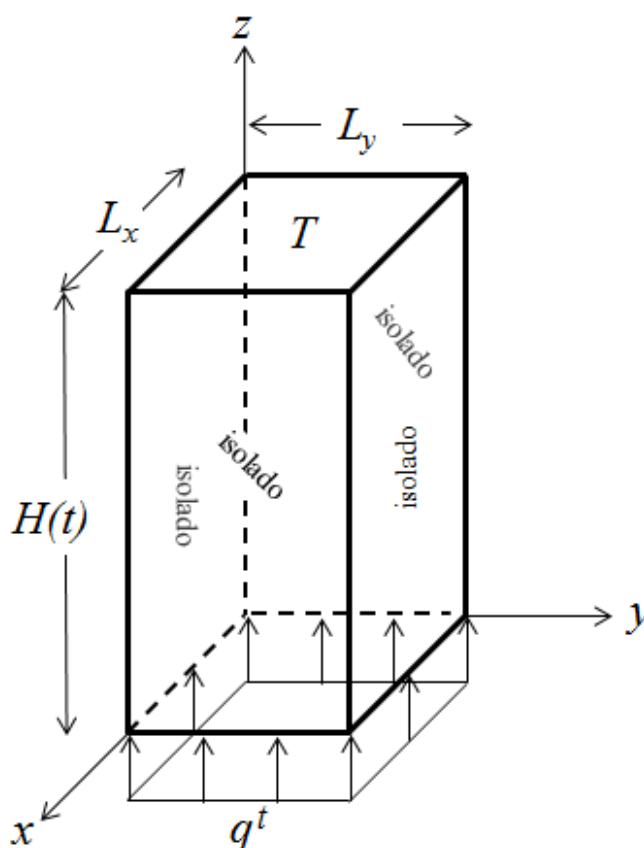


Figura 120: geometria e condições de contorno do modelo térmico

Em $x = 0$ e $x = L_x$:

$$\underline{q}^t \cdot \underline{e}_x = 0 \quad (336)$$

Em $y = 0$ e $y = L_y$:

$$\underline{q}^t \cdot \underline{e}_y = 0 \quad (337)$$

Em $z = 0$:

$$\underline{q}^t \cdot \underline{e}_z = 70 \text{ mW/m}^2 \quad (338)$$

Em $z = H(t)$:

$$T = 0^\circ\text{C} \quad (339)$$

No modelo adotado para o material sedimentar, a homogeneização do calor específico é obtida a partir de (91) e a homogeneização do coeficiente de condutividade térmica por meio das estimativas micromecânicas de Mori-Tanaka (92). Considera-se uma degradação do módulo de Young em função da temperatura por meio de (101) com $A = -5 \times 10^{-4}$. O coeficiente de viscosidade viscoplástico é obtido de (102) com energia de ativação $E_a = 15 \times 10^3 \text{ J/mol}$. A viscosidade da água é obtida de (103). A lei de permeabilidade corresponde à expressão (104).

São consideradas as mesmas propriedades térmicas iniciais para todo material depositado. A temperatura de referência adotada para estabelecer estas propriedades é $T_0 = 0^\circ\text{C}$. A evolução do calor específico da fase sólida do esqueleto é avaliada em função da temperatura a partir de (94) com $c^s(T = 200^\circ\text{C}) = 1.08 \times 10^3 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$, que fornece $c_0^s(T_0) = 7.77 \times 10^2 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$. O calor específico da água é calculado em função da temperatura segundo (96) e (97), $c_0^f(T_0) = 4.24 \times 10^3 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$. Para a condutividade térmica da fase sólida utiliza-se (98) com $k_0^{t,s}(T_0) = 3.44 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ e $A = 3 \times 10^{-3}$, e para a água adota-se (99), $k_0^{t,f}(T_0) = 0.57 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. O coeficiente de dilatação térmica da fase sólida é obtido por meio da equação (100) com coeficientes $a_0 = 1.64 \times 10^{-5}$, $a_1 = 5 \times 10^{-8}$ e $a_2 = -1.5$, que fornecem $\alpha_0^s(T_0) = 10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$.

A partir do estabelecimento das propriedades térmicas da parte sólida do esqueleto e da água, se obtém as seguintes propriedades para o material sedimentar a $T_0 = 0^\circ\text{C}$: calor específico inicial $c_0 = 2.6 \times 10^3 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$ e coeficiente de condutividade térmica inicial $k_0^t = 1.2 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. Não é considerada nenhuma produção de calor interno dos minerais da bacia, $r^t = 0$.

A Figura 121 apresenta a lei de compactação gravitacional da bacia. Ao final da fase de deposição sedimentar, $t = T_{sed} = 60 \text{ Ma}$, o topo da bacia encontra-se em $H(T_{sed}) = 2909.6 \text{ m}$. Os valores de deformação obtidos para $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$ são respectivamente: 36.9%, 51.5%, 58.8% e 60.4%. Ao fim da análise, $t = 10T_{sed} = 600 \text{ Ma}$, a cota superior da bacia está localizada em $H(10T_{sed}) = 2376.3 \text{ m}$. Em comparação com a curva isotérmica reproduzida na figura em linha tracejada (caso 2), pode-se observar que a incorporação dos efeitos da temperatura sobre as propriedades termoporomecânicas do material sedimentar acelerou significativamente o processo de compactação gravitacional da bacia.

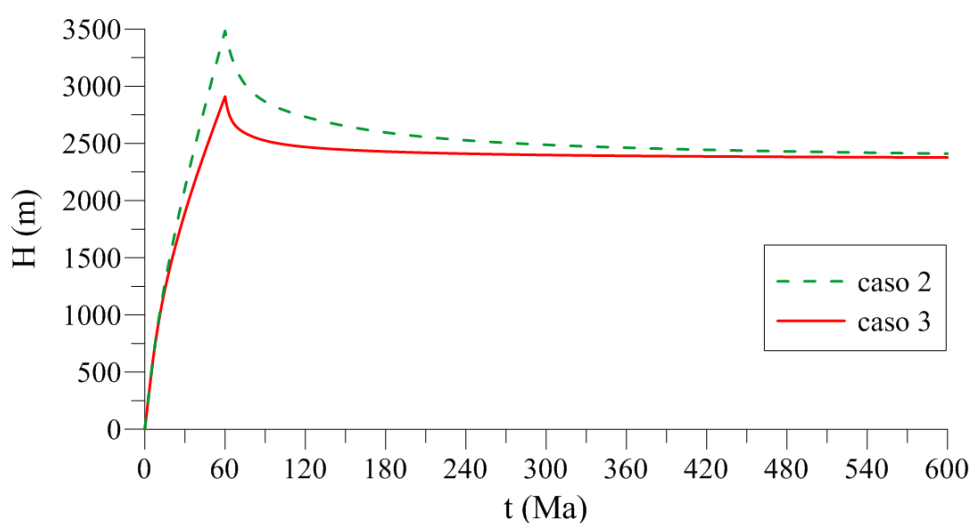


Figura 121: lei de compactação gravitacional da bacia (caso 3)

Os cuidados computacionais associados ao passo de tempo da análise tornam-se ainda maiores ao simular os processos de deformação mecânica e químico-mecânica da bacia em condições não-isotérmicas. Além dos passos de tempo mínimos δt_{min}^f e δt_{min}^{vp} que devem ser respeitados no módulo poromecânico, deve-se respeitar o passo de tempo mínimo δt_{min}^t no módulo térmico. Outro aspecto importante diz respeito à escolha adequada de como será realizada a sincronização dos instantes de tempo em que ocorre a troca de informações entre os módulos.

A mesma geometria e discretização espacial são utilizadas para o problema térmico e poromecânico. A única diferença está no tipo de elemento hexaédrico adotado. Enquanto o módulo poromecânico utiliza elementos de 20 nós, o problema térmico trabalha com hexaedros de 8 nós. Para que a geometria do problema de condução térmica acompanhe a deformação da bacia, a malha do módulo térmico é atualizada de acordo com os deslocamentos obtidos no módulo poromecânico cada vez que estes são sincronizados. A discretização temporal do programa termoporomecânico está esquematizada na Figura 53, onde o passo de tempo do módulo poromecânico é obtido de acordo com a equação (279) e o passo de tempo do módulo térmico a partir da equação (285), definida em função de (273), (279) e (284).

Para investigar a influência do tamanho dos elementos e do passo de tempo da análise no problema termoporomecânico, foram realizadas simulações com diferentes discretizações espaciais e temporais. O estudo da discretização espacial é realizado adotando-se malhas com 20, 30, 60 e 120 elementos hexaédricos regularmente distribuídos ao longo da espessura da bacia. Apesar da lei de evolução de η_{vp} e da degradação de E_{oed} em função da temperatura, constatou-se que $\delta t_{min}^{vp} \gg \delta t_{min}^f$ ao longo de toda a análise. Isto significa que o passo de tempo do problema poromecânico continua a ser controlado pela difusão da massa fluida. O estudo da discretização temporal é realizado empregando-se quatro valores para o coeficiente β^t da expressão (273) e β^f de (279). Todas as análises foram realizadas para $\beta^t = \beta^f$. Os valores adotados foram: 0.5, 1, 5 e 10. Os resultados são comparados para a altura da bacia ao fim da fase de deposição sedimentar, $H(t = T_{sed})$. Observa-se que, diferentemente da Tabela 1 e da Tabela 2, os valores obtidos para cada malha foram praticamente iguais para os diferentes valores de β , indicando uma influência significativa dos efeitos térmicos sobre o processo de compactação. Os resultados a seguir correspondem à malha de 120 elementos e $\beta^f = \beta^t = 10$.

Tabela 3: solução para diferentes discretizações espaciais e temporais (caso 3)

Propriedades da malha			$H(t = T_{sed})$			
<i>elementos</i>	<i>nós UP/T</i>	<i>gdl UP/T</i>	$\beta^{f,t} = 0.5$	$\beta^{f,t} = 1$	$\beta^{f,t} = 5$	$\beta^{f,t} = 10$
20	248/84	828/84	3010.6	3010.5	3010.1	3011.1
30	368/124	1228/124	2967.5	2967.5	2967.4	2967.4
60	728/244	2428/244	2928.1	2928.1	2928.0	2928.2
120	1448/484	4828/484	2909.7	2909.7	2909.6	2909.6

6.1.1 Caso 3: análise local

A Figura 122 apresenta a evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia. As curvas demonstram que os efeitos da temperatura aceleraram os processos de deformação no material sedimentar. Em comparação ao caso isotérmico, o regime elástico permaneceu no mesmo intervalo, $0 \leq t \leq t^e \approx 6$ Ma. No entanto, o início das deformações viscoplásticas ocorreu mais cedo, antecipando o fim do regime elasto-plástico, $t^e \leq t \leq t^p \approx 10$ Ma. O mesmo ocorreu para o fim do regime elasto-plástico-viscoplástico, $t^p \leq t \leq t^{vp} \approx 24$ Ma. A partir deste momento, a base da bacia permaneceu no regime elasto-viscoplástico até o fim da análise, para o qual se obteve $J^{ir} = 0.282$, valor muito próximo ao limite $J^{ir} > 1 - \phi_0 = 0.28$.

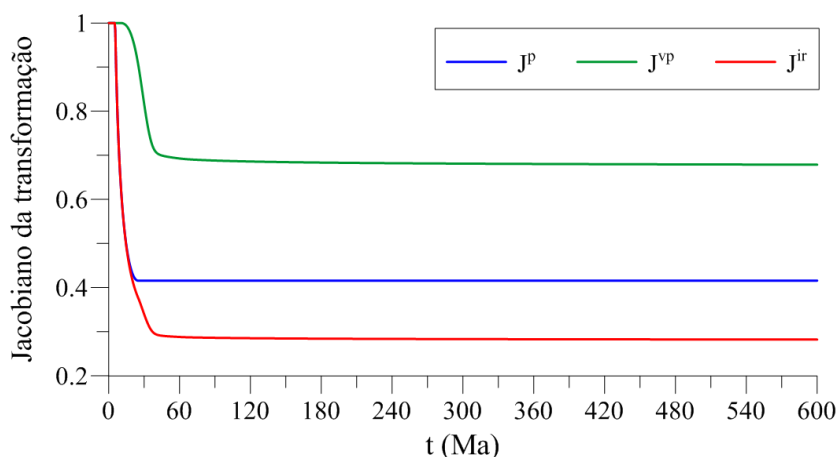


Figura 122: evolução do Jacobiano da transformação na base da bacia (caso 3)

A Figura 123 fornece as normas das taxas de deformação plástica $\left| \underline{\underline{d}}^p \right|$ e viscoplástica $\left| \underline{\underline{d}}^{vp} \right|$ ao longo da análise. Em comparação com a análise isotérmica, observa-se que o pico da taxa de deformação viscoplástica deu-se muito mais cedo, $t = 30$ Ma, e com valor muito maior, $\left| \underline{\underline{d}}^{vp} \right| \approx 0.02 \text{ Ma}^{-1}$. Isto é atribuído aos efeitos da temperatura sobre o coeficiente de viscosidade viscoplástico. Conforme o material esquenta, η_{vp} diminui de acordo com a equação (102). Segundo a regra de fluxo viscoplástico (66), quanto menor o valor de η_{vp} , maior será $\underline{\underline{d}}^{vp}$. Isto também explica por que a transição do regime elasto-plástico-viscoplástico para o regime elasto-viscoplástico ocorreu mais cedo, já que esta transição está associada à relaxação das tensões efetivas, atribuída às deformações viscoplásticas no material.

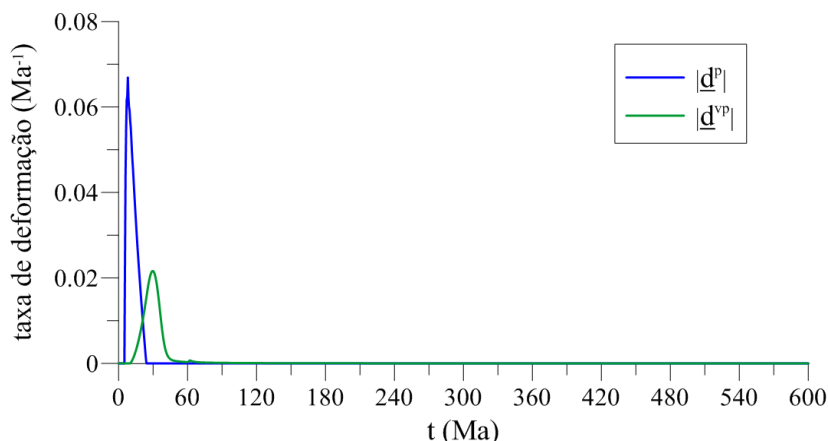


Figura 123: evolução da norma das taxas de deformação plástica e viscoplástica na base da bacia (caso 3)

A curva de evolução da porosidade está representada na Figura 124, onde é possível ver claramente a diferença na velocidade de compactação em relação ao caso isotérmico. A camada depositada com 72% de porosidade encontra-se com 56% ao fim do regime elasto-plástico, $t^p \approx 10$ Ma, e 26.8% ao fim do regime elasto-plástico-viscoplástico, $t^{vp} \approx 24$ Ma. Aos 30, 60, 120 e 600 milhões de anos o material apresenta 17.4%, 2.8%, 1.8% e 0.8%, respectivamente.

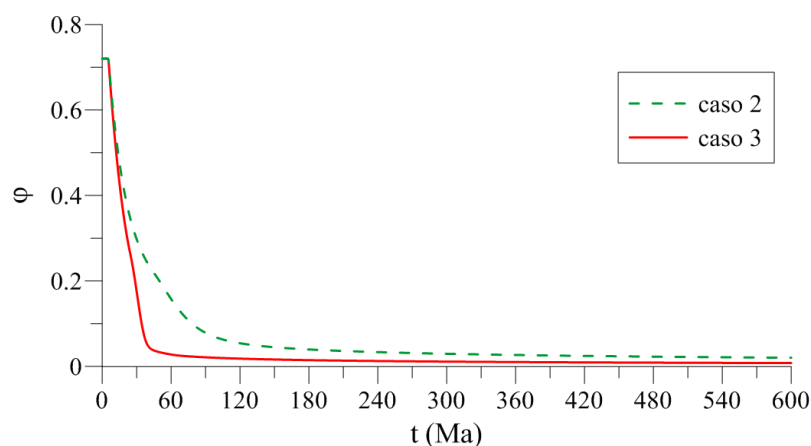


Figura 124: evolução da porosidade na base da bacia (caso 3)

A Figura 125 apresenta a evolução da temperatura na base da bacia. O comportamento da curva da temperatura é similar ao comportamento da lei de compactação gravitacional. Durante a fase de deposição sedimentar, a temperatura se eleva conforme aumenta a altura da camada de sedimentos. Após esta fase, a temperatura diminui conforme avança o processo de compactação. O material depositado no assoalho oceânico com temperatura $T_0 = 0^\circ\text{C}$ chega a $T = 123^\circ\text{C}$ em $t = 60$ Ma e encontra-se com $T = 87^\circ\text{C}$ ao fim da análise, $t = 600$ Ma.

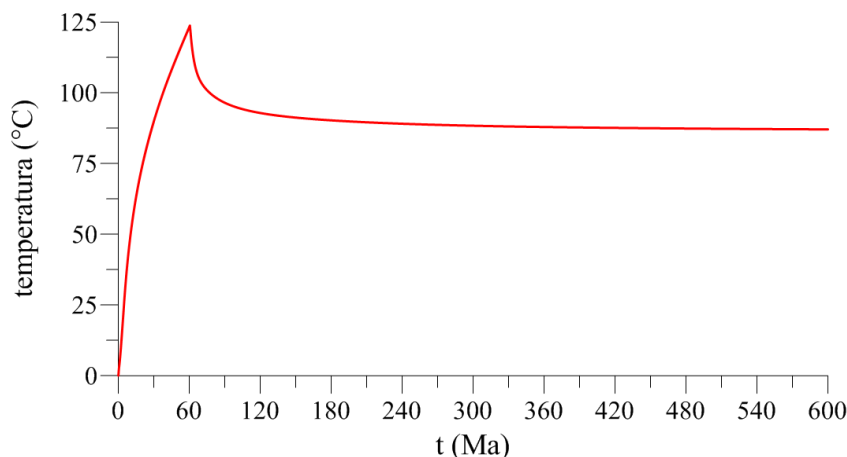


Figura 125: evolução da temperatura na base da bacia (caso 3)

Como a temperatura afeta as propriedades físico-químicas dos minerais, a incorporação de uma lei de evolução para o coeficiente de viscosidade viscoplástico η_{vp} em função da temperatura é essencial na modelagem das deformações químico-mecânicas de uma bacia sedimentar, pois permite ajustar a velocidade dos fenômenos envolvidos no processo de pressão-solução dos sedimentos. Os efeitos da temperatura sobre este parâmetro podem ser vistos na Figura 126, que apresenta a evolução da relação η_{vp}/η_{vp0} na base da bacia. Nota-se que em $t = 30$ Ma, quando ocorre o pico da norma da taxa de deformação viscoplástica $\left| \underline{\underline{d}}^{vp} \right|$, tem-se $\eta_{vp}/\eta_{vp0} \approx 0.2$. O valor mínimo ocorre para $t = 60$ Ma, momento em que se tem a maior temperatura na base da bacia, $\eta_{vp}/\eta_{vp0} \approx 0.13$. Com o resfriamento da bacia, o valor obtido ao fim da análise, $t = 600$ Ma, é de $\eta_{vp}/\eta_{vp0} \approx 0.2$.

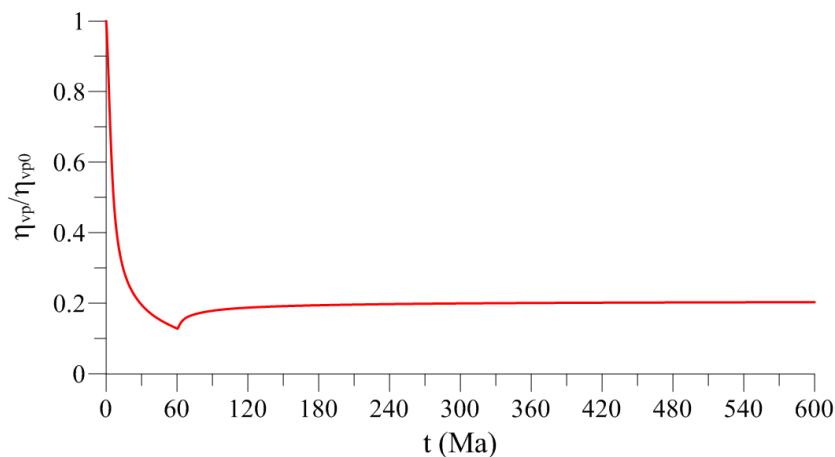


Figura 126: evolução do coeficiente de viscosidade viscoplástico na base da bacia (caso 3)

Outro parâmetro chave envolvido na simulação não-isotérmica da história de deformação de uma bacia sedimentar é a evolução da viscosidade dos fluidos em função da temperatura. Lembrando que neste trabalho o único fluido considerado é a água, a Figura 127 ilustra, para a camada que compõe a base da bacia, a evolução da razão η_0^f / η^f , relação utilizada na lei de evolução do coeficiente de permeabilidade do material (104). A curva ilustrada segue o comportamento da curva de temperatura. Aos 30, 60, 120 e 600 milhões de anos, os valores obtidos para η_0^f / η^f foram, respectivamente, 5.6, 7.9, 5.7 e 5.4.

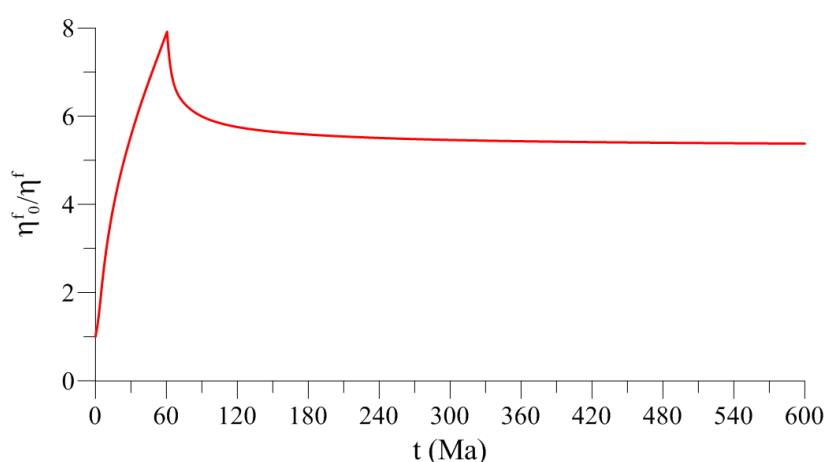


Figura 127: evolução da viscosidade da água na base da bacia (caso 3)

A evolução da viscosidade do fluido afeta diretamente o processo de compactação da bacia, pois quanto menos viscoso for o fluido, mais fácil será o seu escoamento no meio poroso e, portanto, mais rápida será a dissipação do excesso de poro-pressão, o carregamento e a deformação do esqueleto. A Figura 128 apresenta a evolução do coeficiente de permeabilidade na base da bacia, normalizado pelo seu valor inicial, k^f / k_0^f . Observa-se que em $t \approx 6$ Ma, os sedimentos encontram-se com $T = 32^\circ\text{C}$ e $\eta_0^f / \eta^f \approx 2$. Este instante caracteriza o fim do regime elástico, para o qual o material ainda não sofreu deformações de caráter irreversível. Logo, a partir da equação (104), tem-se $k^f / k_0^f \approx 2$. No caso isotérmico tem-se $k^f / k_0^f = 1$ para este mesmo instante. Conforme o material segue em processo de compactação, o aumento da temperatura e a diminuição da viscosidade da água atenuam o impacto da evolução da sua microestrutura sobre a permeabilidade, como se pode observar na curva do caso 3 em comparação com a curva tracejada do caso 2 (isotérmico) da figura.

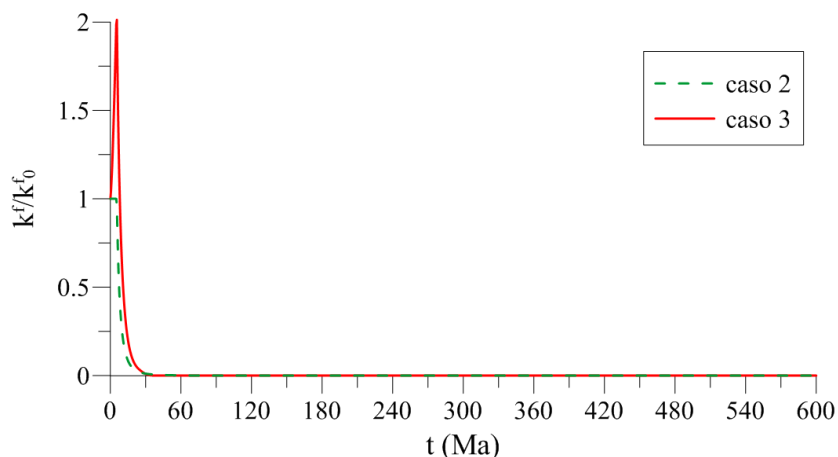


Figura 128: evolução da permeabilidade na base da bacia (caso 3)

O histórico da poro-pressão na base da bacia pode ser analisado na Figura 129. A pressão parte do valor hidrostático de 78.4 MPa em $t = 0$ e aumenta conforme os sedimentos são depositados, atingindo o valor máximo de 92.8 MPa em $t = 60$ Ma. A partir deste momento a camada de sedimentos localizada na base da bacia segue em processo de dissipação da poro-pressão, que ao fim da análise, $t = 600$ Ma, é de 91.6 MPa. Ao contrário do caso isotérmico, a curva não apresenta um período de aumento da poro-pressão associado ao fenômeno de relaxação após o fim da fase de deposição sedimentar. A curva da tensão efetiva vertical na Figura 130 mostra que na presente análise o fenômeno de relaxação é dominante ao longo de $33 \leq t \leq t' \approx 43$ Ma, diferente do caso isotérmico, onde ocorre para $T_{sed} \leq t \leq t' \approx 136$ Ma. A incorporação dos efeitos da temperatura no comportamento do material acelerou o processo de compactação da bacia e aumentou a taxa e a magnitude das deformações viscoplásticas, antecipando significativamente o período de relaxação das tensões efetivas.

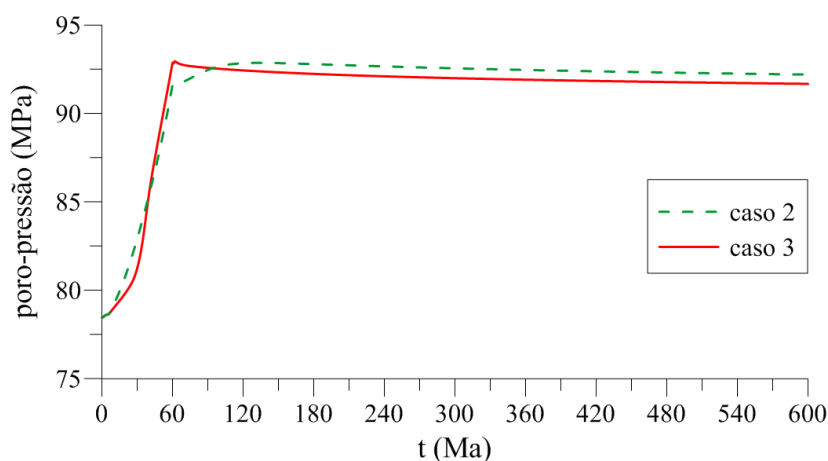


Figura 129: evolução da poro-pressão na base da bacia (caso 3)

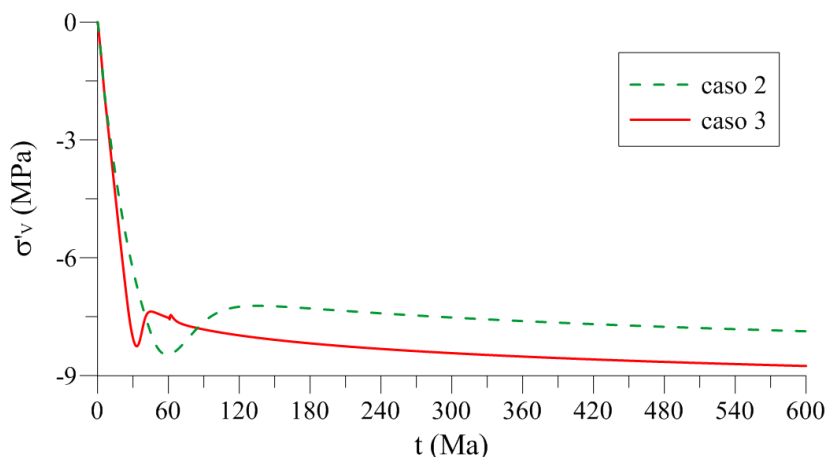


Figura 130: evolução da tensão efetiva vertical na base da bacia (caso 3)

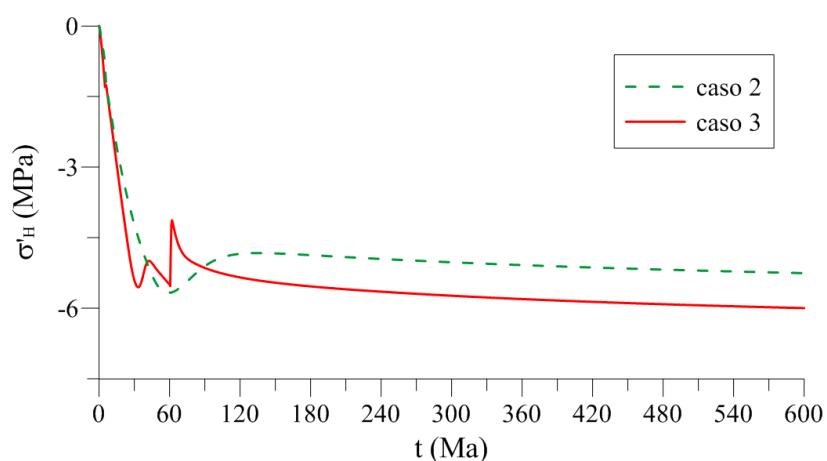


Figura 131: evolução da tensão efetiva horizontal na base da bacia (caso 3)

A Figura 131 mostra a evolução da tensão efetiva horizontal na base da bacia. É possível observar que após o fim do período de relaxação $t' \approx 43$ Ma a curva tem um comportamento descendente acentuado até o fim do período de deposição $t = 60$ Ma, quando apresenta um salto seguido de um comportamento descendente que permanece até o fim da análise. A curva da tensão efetiva vertical da Figura 130 também apresenta uma perturbação para $t = 60$ Ma.

A investigação e interpretação do que causou este fenômeno é uma tarefa difícil, já que envolve diversos processos simultâneos que atuam na bacia de forma acoplada. As curvas do coeficiente K_0 e da relação $-q/p'$ apresentadas na Figura 132 e Figura 133 podem ajudar a interpretar este fenômeno. Estas curvas apresentam comportamentos bem diferentes das curvas isotérmicas (caso 2) para o intervalo aproximado de $40 \leq t \leq 100$ Ma, além do fato de

apresentarem o mesmo salto de σ'_H ao fim da fase de deposição $t = 60$ Ma. Fora deste intervalo e para $t \geq t^e \approx 6$ Ma, tem-se os valores regulares $K_0 \approx 0.67$ e $-q/p' \approx 0.4$. A curva de temperatura da Figura 125 demonstra que este intervalo $40 \leq t \leq 100$ Ma corresponde ao período em que a bacia está mais aquecida, o que indica uma influência da temperatura sobre o comportamento da tensão efetiva horizontal σ'_H , e consequentemente de K_0 e $-q/p'$.

Neste momento é necessário fazer uma reflexão sobre as condições de contorno do problema poromecânico apresentadas na Figura 58. O fato de impedir o deslocamento normal nas faces laterais da coluna para mantê-la em condições oedométricas é incompatível com as deformações térmicas isotrópicas que ocorrem conforme a bacia sofre variações de temperatura. Portanto, conforme a bacia aquece, ela é impedida de dilatar lateralmente, o que leva ao desenvolvimento significativo de tensões efetivas horizontais de origem térmica. Como a bacia está livre na face superior, o mesmo não ocorre para as tensões efetivas verticais. Isto pode explicar o fenômeno observado ao longo de $40 \leq t \leq 100$ Ma nas curvas de σ'_H , K_0 e $-q/p'$, assim como o salto que ocorre para $t = 60$ Ma, quando a base da bacia para de aquecer e passa a esfriar, como mostra a Figura 125. Com exceção destas curvas, os demais resultados apresentados até o momento não apresentam perturbações bruscas associadas à variação de temperatura. As análises globais da bacia fornecerão informações complementares a respeito da relevância deste fenômeno local sobre o seu comportamento como um todo.

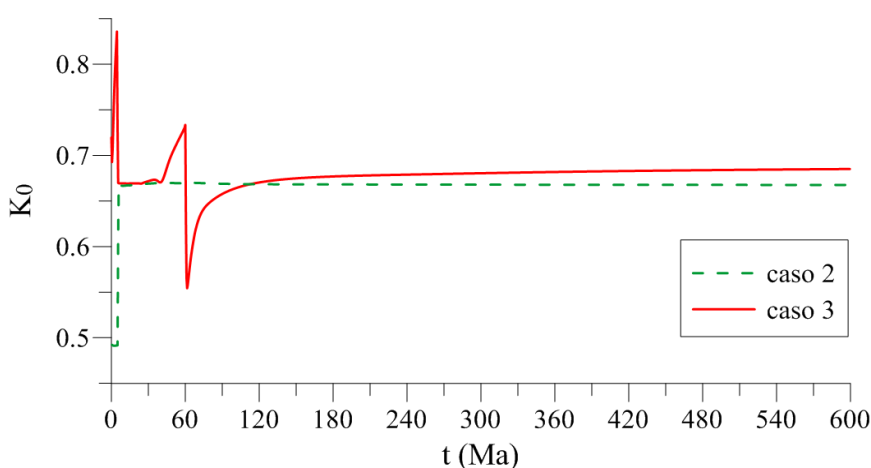


Figura 132: evolução do coeficiente K_0 na base da bacia (caso 3)

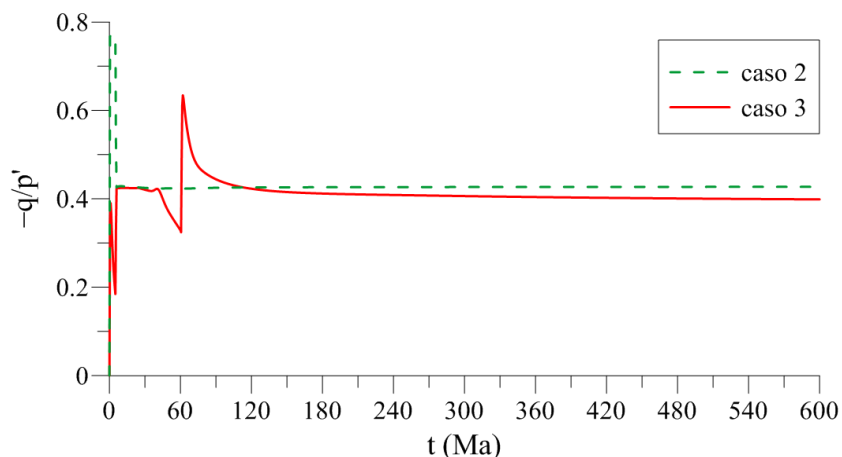


Figura 133: evolução da relação tensão desviadora/tensão efetiva média na base da bacia (caso 3)

A Figura 134, Figura 135, e Figura 136 apresentam, respectivamente, a evolução da pressão de consolidação plástica e viscoplástica, da massa específica e do módulo de Young na base da bacia. Os valores para $t = 600$ Ma são: $p_c = 22.1$ MPa, $p_{vp}^s = 7.7$ MPa, $\rho = 2311$ kg/m³ e $E = 5619$ MPa. Não se atribui impacto significativo associado à taxa de degradação de 5% a cada 100°C adotada para o Módulo de Young. No entanto, a evolução deste parâmetro pode ter maior relevância para casos em que se atingem maiores temperaturas, ou para materiais nos quais o aumento ou degradação da rigidez seja mais sensível em função da temperatura.

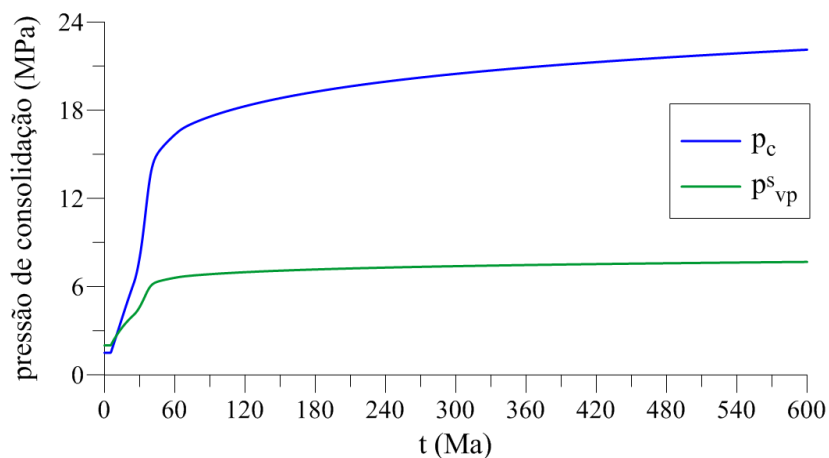


Figura 134: evolução da pressão de consolidação na base da bacia (caso 3)

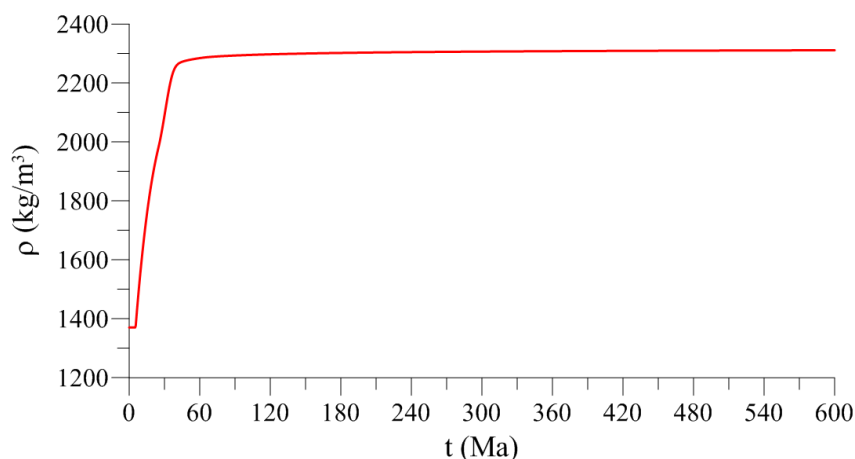


Figura 135: evolução da massa específica na base da bacia (caso 3)

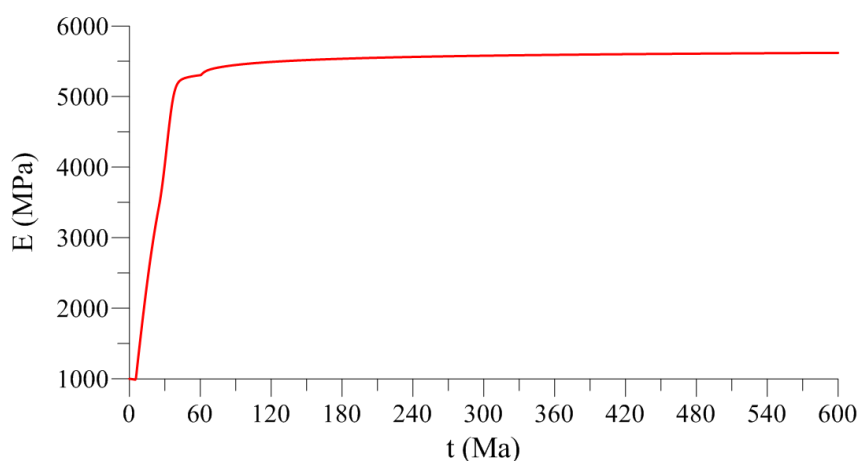


Figura 136: evolução do módulo de Young na base da bacia (caso 3)

A Figura 137, Figura 138 e Figura 139 apresentam a evolução do módulo de compressão K , do coeficiente de dilatação térmica da fase sólida do esqueleto α^s e do coeficiente de dilatação térmica associado à porosidade α^ϕ , respectivamente. As curvas de K e α^s fornecem maiores informações para a discussão a respeito do efeito da temperatura sobre o estado de tensão do material. Conforme o material sedimentar deforma diminuindo sua porosidade, ele rapidamente atinge valores muito altos para K , na ordem de 10^5 MPa, que associado a um coeficiente de dilatação térmica α^s na ordem de $10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ e uma variação de temperatura na ordem de 10 a 100°C leva a tensões de origem térmicas muito elevadas. Isto explica o comportamento observado na curva de σ'_H no intervalo em que a porosidade do material já se encontra muito pequena em conjunto a grandes variações de temperatura.

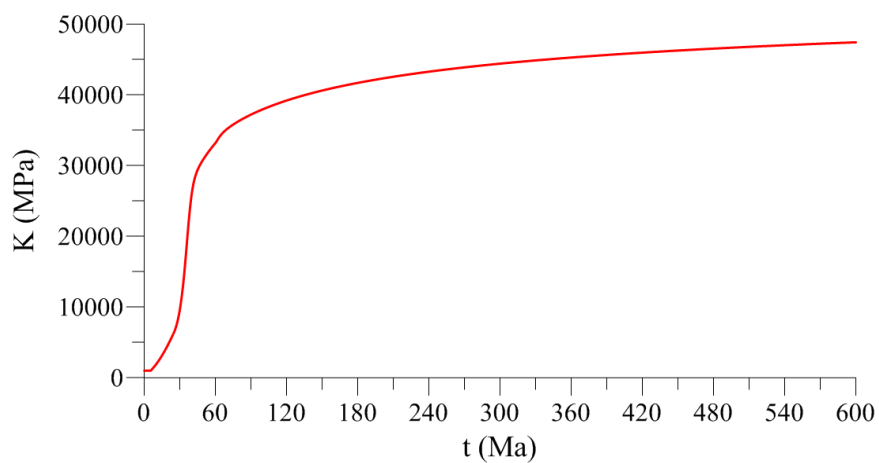


Figura 137: evolução do módulo de compressão na base da bacia (caso 3)

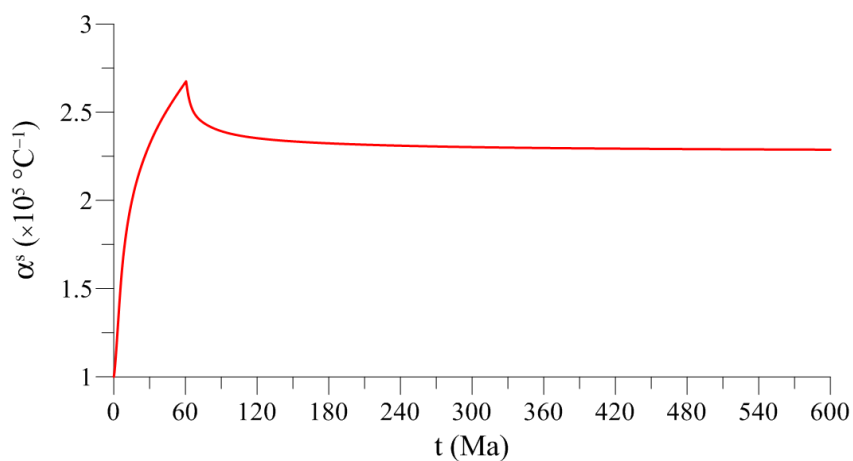


Figura 138: evolução do coeficiente de dilatação térmica α^s na base da bacia (caso 3)

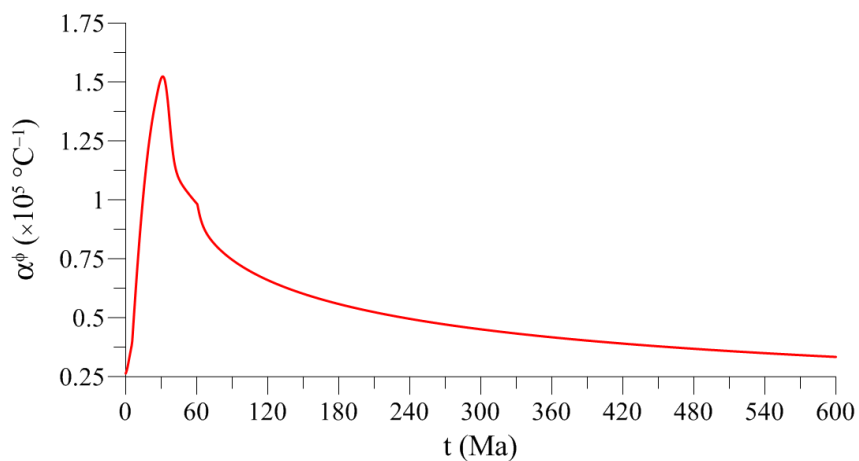


Figura 139: evolução do coeficiente de dilatação térmica α^ϕ na base da bacia (caso 3)

A Figura 140 e a Figura 141 ilustram a evolução do coeficiente e do módulo de Biot na base da bacia. Pode-se dizer que os valores obtidos para o coeficiente de Biot ao fim da análise, $b = 0.1$, são questionáveis para rocha sedimentares. No entanto, a porosidade associada a este valor é de 0.8%, que representa um material praticamente monofásico. A teoria indica que quando $\varphi \rightarrow 0$, tem-se $b \rightarrow 0$ e $M \rightarrow \infty$, como pode ser observado nas curvas apresentadas.

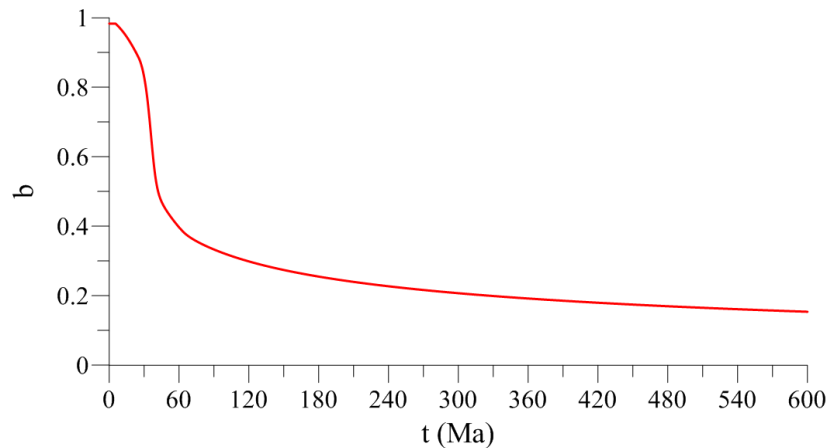


Figura 140: evolução do coeficiente de Biot na base da bacia (caso 3)

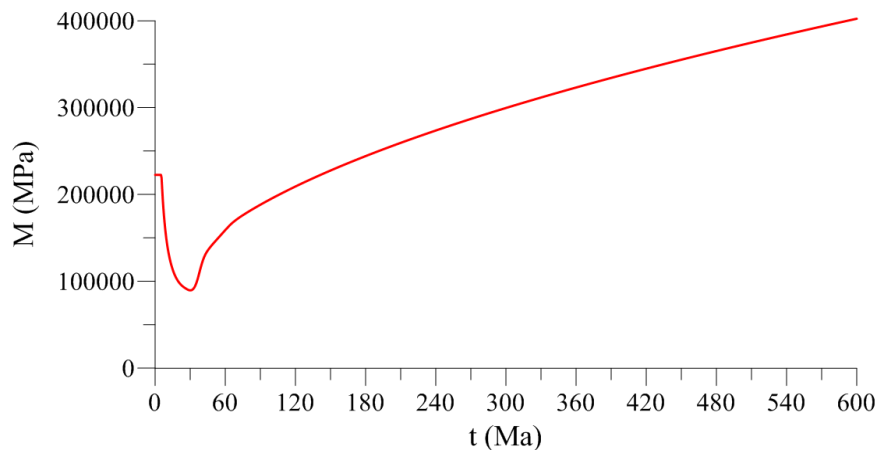


Figura 141: evolução do módulo de Biot na base da bacia (caso 3)

A evolução do calor específico c e do coeficiente de condutividade térmica k^t na base da bacia pode ser analisada na Figura 142 e Figura 143, respectivamente. Ambos os parâmetros evoluem em função da porosidade e da temperatura. O material poroso é depositado com $\varphi = 72\%$, $c = 2600 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$ e $k^t = 1.2 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. Em função da compactação e do aumento da temperatura, em $t = 60 \text{ Ma}$ tem-se $\varphi = 2.8\%$, $c = 1012 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$ e $k^t = 2.4 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. A partir

do fim da fase de deposição sedimentar a bacia segue em processo de compactação e resfriamento. Para $t = 600$ Ma tem-se $\varphi = 0.8\%$, $c = 934$ J/kg°C e $k^t = 2.7$ W/m°C.

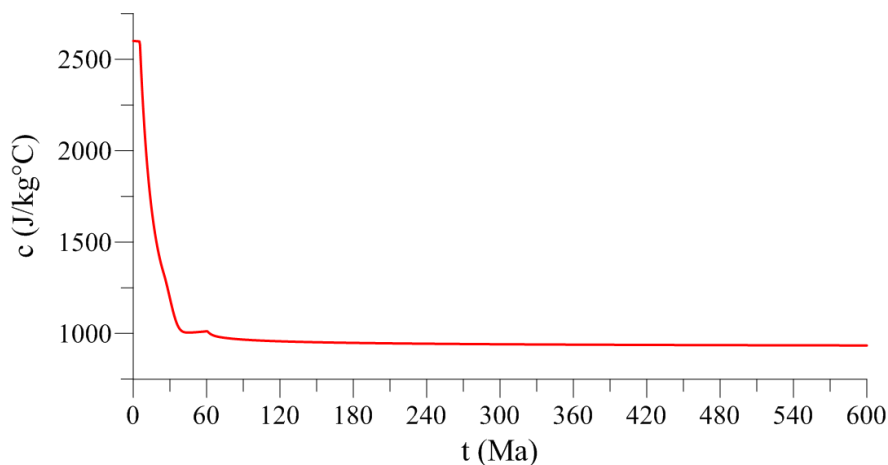


Figura 142: evolução do calor específico na base da bacia (caso 3)

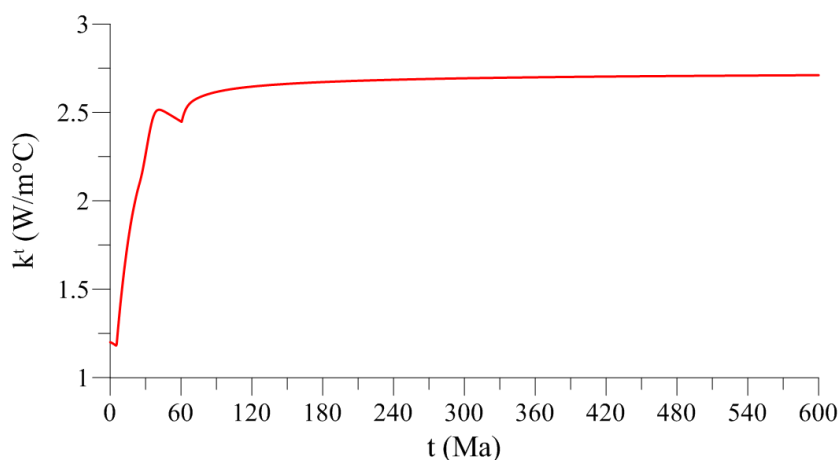


Figura 143: evolução da condutividade térmica na base da bacia (caso 3)

A Figura 144 apresenta a evolução da difusividade térmica do material α , e a Figura 145 a evolução do coeficiente de difusividade líquida c_m na base da bacia. Enquanto o parâmetro α estabelecido na expressão (272) controla a velocidade de condução térmica na bacia, o coeficiente c_m definido em (276) controla a velocidade do escoamento do fluido no meio poroso. Embora determinados por diversos parâmetros, pode-se observar que a curva de α tem o mesmo comportamento da curva do coeficiente de condutividade térmica k^t , e que a curva de c_m tem o mesmo comportamento do coeficiente de permeabilidade k^f .

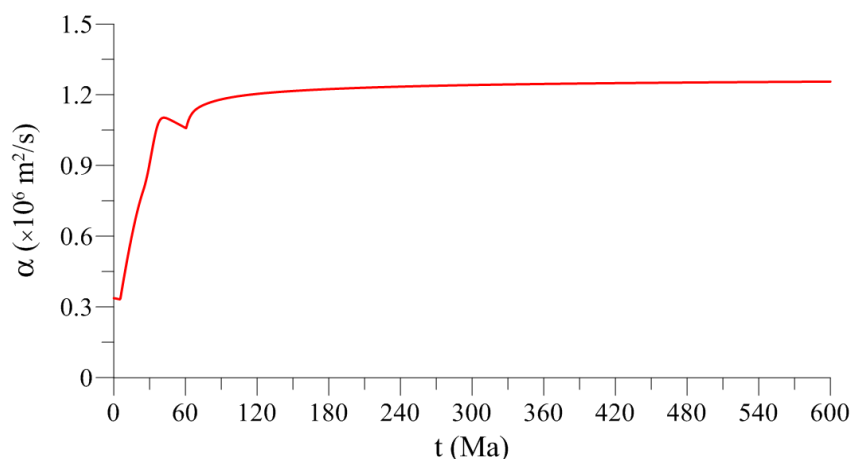


Figura 144: evolução da difusividade térmica na base da bacia (caso 3)

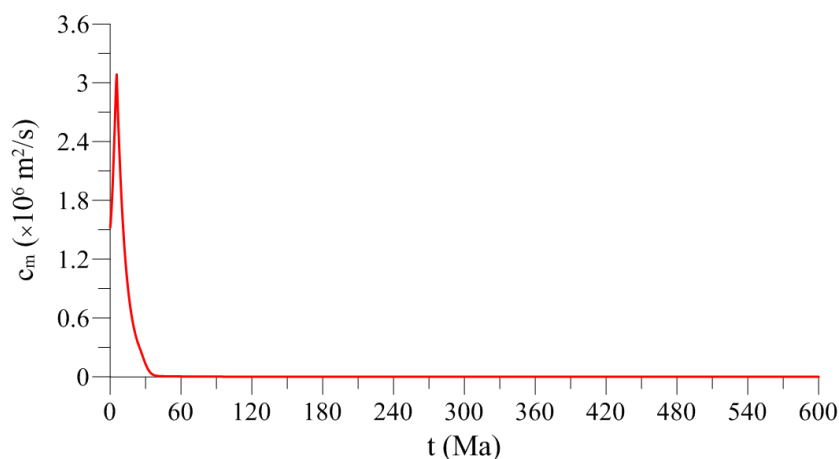


Figura 145: evolução da difusividade líquida na base da bacia (caso 3)

A Figura 146 apresenta a evolução do passo de tempo de referência de difusão da massa líquida Δt_{ref}^f , do passo de tempo de referência viscoplástico Δt_{ref}^{vp} , e do passo de tempo de referência de condução térmica Δt_{ref}^t na base da bacia, calculados de acordo com as expressões (275), (278) e (271), respectivamente. No instante inicial tem-se $\Delta t_{ref}^f = 52.1$, $\Delta t_{ref}^{vp} = 674925.4$ e $\Delta t_{ref}^t = 235.3$ anos. Conforme a simulação avança, compactando e esquentando o material, os passos de tempo de referência evoluem. Para $t = 60$ Ma tem-se $\Delta t_{ref}^f = 1742.2$, $\Delta t_{ref}^{vp} = 3538.6$ e $\Delta t_{ref}^t = 6.5$ anos. Ao fim da análise, $t = 600$ Ma, o elemento localizado na base da bacia apresenta $\Delta t_{ref}^f = 31582.8$, $\Delta t_{ref}^{vp} = 4030.5$ e $\Delta t_{ref}^t = 5.2$ anos.

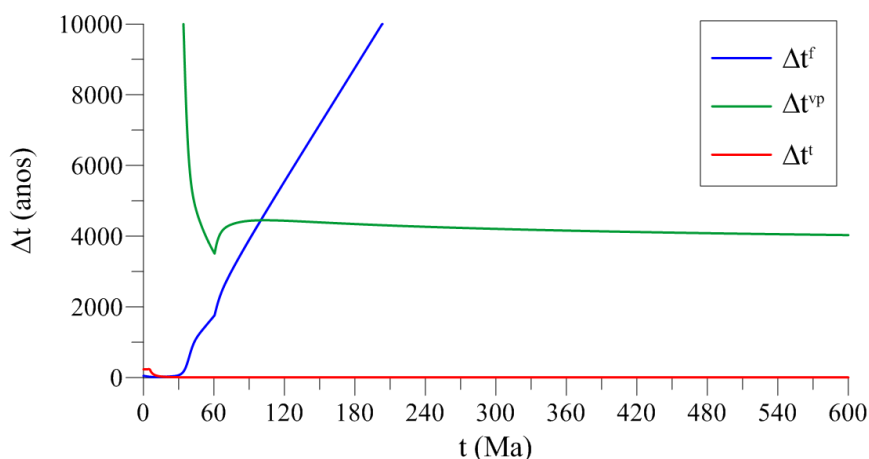


Figura 146: evolução dos passos de tempo Δt_{ref} na base da bacia (caso 3)

6.1.2 Caso 3: análise global

A análise global é realizada para $t = T_{sed}/2$, $t = T_{sed}$, $t = 2T_{sed}$ e $t = 10T_{sed}$, que correspondem, respectivamente, a 30, 60, 120 e 600 milhões de anos de idade da bacia. A Figura 147 apresenta os perfis de Jacobiano irreversível da transformação. Em comparação aos perfis apresentados na Figura 102 para o caso isotérmico, pode-se ver que o caso não-isotérmico apresenta valores inferiores de J^{ir} para todas as idades, indicando maior grau de compactação. Portanto, o impacto dos efeitos da temperatura sobre o comportamento do material sedimentar é de fato muito significativo sobre a história de deformação da bacia. Observa-se que para $t = 60$ Ma, a camada inferior de aproximadamente 500 metros já apresenta níveis de deformação muito próximos ao perfil $t = 120$ Ma, que pouco muda em relação a $t = 600$ Ma.

A Figura 148 mostra os perfis de Jacobiano plástico e viscoplástico. Em comparação ao caso isotérmico da Figura 103, nota-se que o grau de deformação puramente mecânica na bacia foi menor para o caso não-isotérmico. Atribui-se isto ao fato da evolução do coeficiente de viscosidade viscoplástico η_{vp} em função da temperatura acentuar as deformações químico-mecânicas no material, antecipando a transição do regime elasto-plástico-viscoplástico para o regime elasto-viscoplástico. Nota-se também que a diferença do grau de compactação químico-mecânica entre o caso isotérmico e não-isotérmico é expressiva para todas idades da bacia.

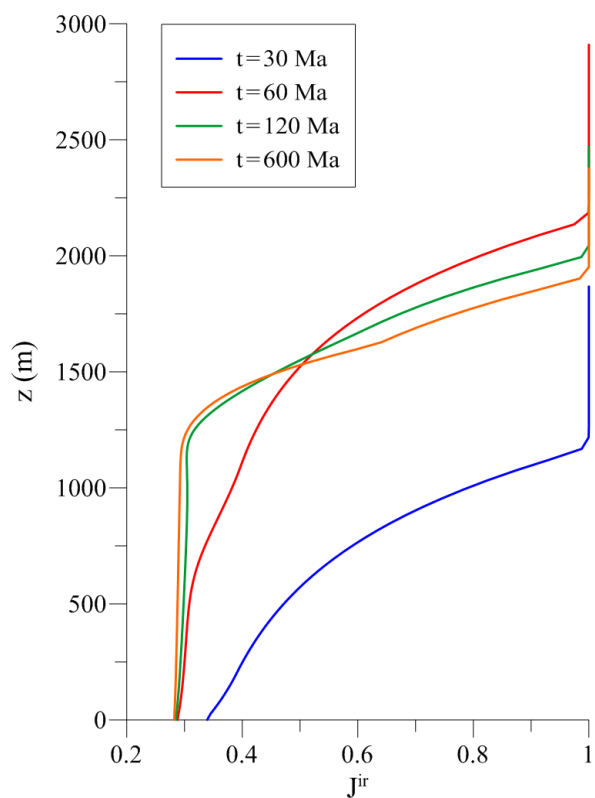


Figura 147: perfil de Jacobiano irreversível na bacia (caso 3)

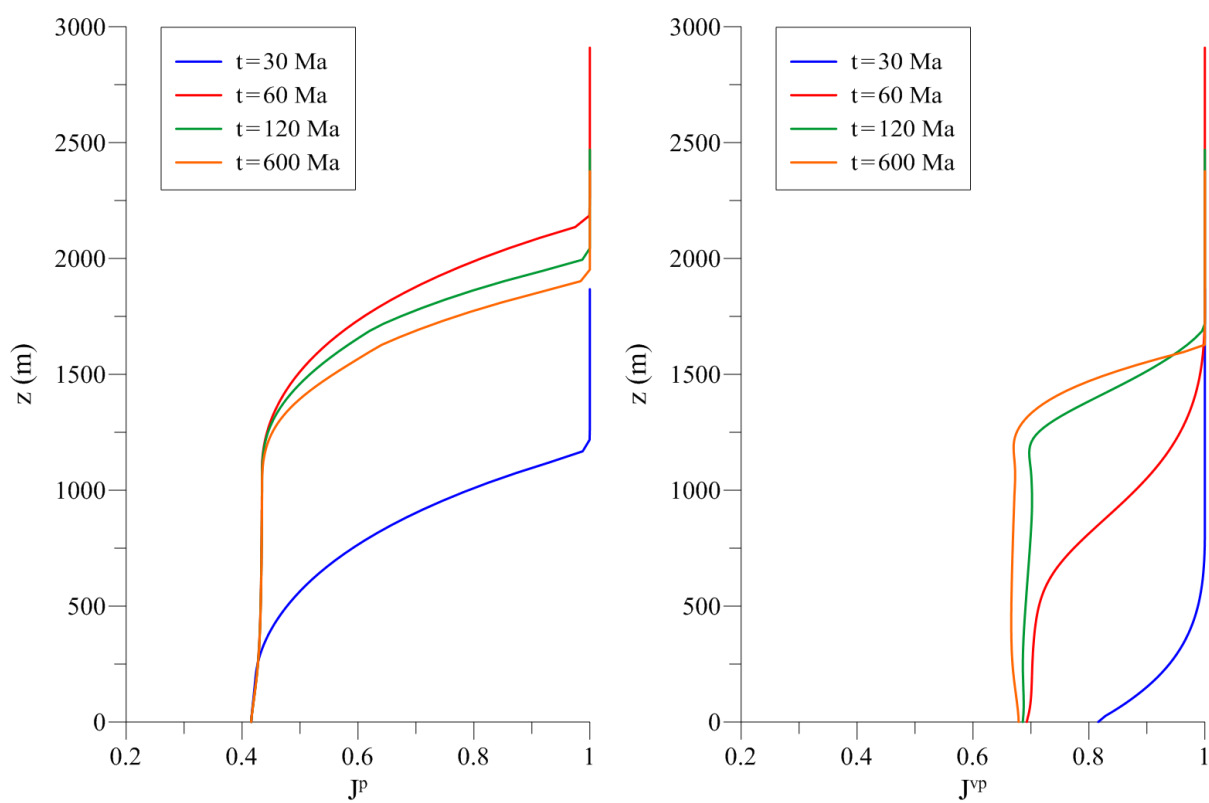


Figura 148: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia (caso 3)

Os perfis de porosidade da bacia estão representados na Figura 149. Como é calculada em função do grau de deformação irreversível do material a partir de J^{ir} , verifica-se que a evolução da porosidade é mais rápida no caso não-isotérmico. As camadas que mantiveram o valor inicial $\phi_0 = 0.72$ correspondem às regiões que permaneceram no regime elástico.

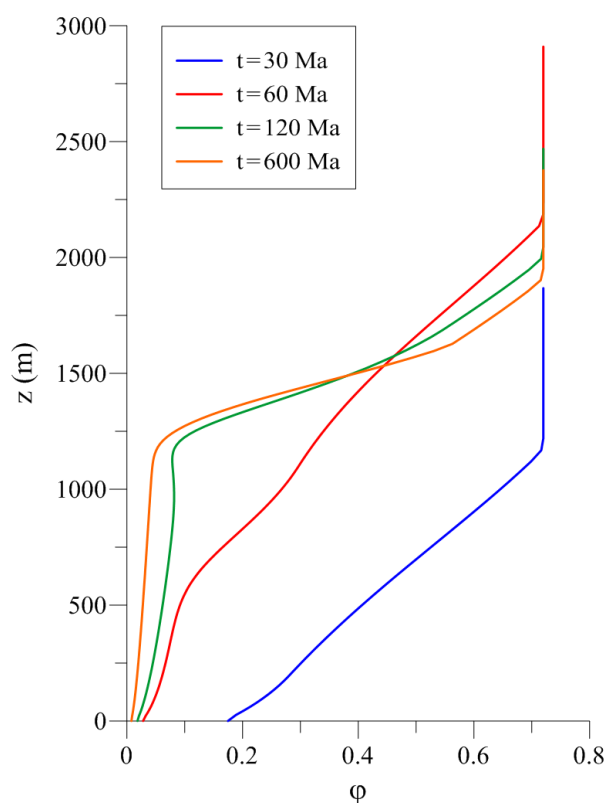


Figura 149: perfil de porosidade na bacia (caso 3)

No contexto da engenharia do petróleo, a obtenção de perfis de temperatura para diferentes idades das bacias é muito importante, pois eles permitem identificar as faixas de temperatura em que as diferentes camadas foram submetidas, e durante quanto tempo isto ocorreu. Esta informação é de grande relevância, pois a geração de óleo e gás é sensível a muitos fatores como a velocidade de aquecimento da rocha geradora, as temperaturas em que ela é aquecida e o tempo de exposição a estas temperaturas. As janelas de temperatura correspondentes à produção de óleo e gás dependem do tipo de matéria orgânica: para o óleo costuma ser de $50 \leq T \leq 150^\circ\text{C}$ e para o gás de $150 \leq T \leq 200^\circ\text{C}$.

A Figura 150 apresenta os perfis de temperatura para as diferentes idades investigadas. Observa-se em todos os casos que o gradiente de temperatura $\partial T/\partial z$ não é constante ao longo da

profundidade da bacia. Embora todo o material depositado tenha as mesmas propriedades térmicas iniciais, estas são modificadas de acordo com o grau de compactação de cada camada, o que resulta em um problema de condução térmica de um material heterogêneo. Considerando que a temperatura é prescrita no topo da bacia $T^d = 0^\circ\text{C}$, a variação média da temperatura ao longo da profundidade $T(z=0)/H(t)$ aos 30, 60, 120 e 600 milhões de anos é de 47.5, 42.3, 37.6 e $36.6^\circ\text{C}/\text{km}$, respectivamente.

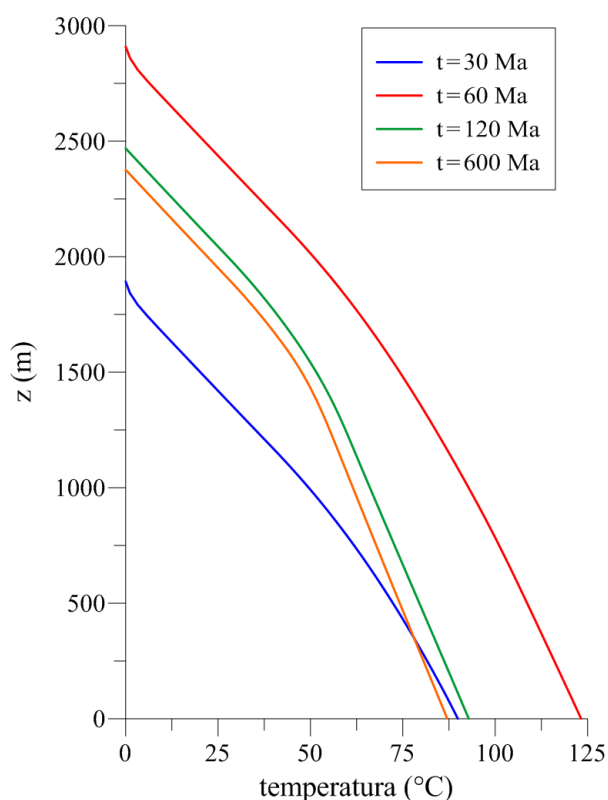


Figura 150: perfil de temperatura na bacia (caso 3)

A Figura 151 exibe os perfis de poro-pressão. Em comparação aos resultados isotérmicos da Figura 105, os perfis do problema não-isotérmico estão muito mais próximos do valor hidrostático, ou seja, apresentam menor excesso de poro-pressão. Isto se deve à evolução da viscosidade da água em função da temperatura. Conforme as camadas são aquecidas, a água esquentada tornando-se menos viscosa, o que facilita o escoamento do fluido no material poroso e a dissipação do excesso de poro-pressão na bacia.

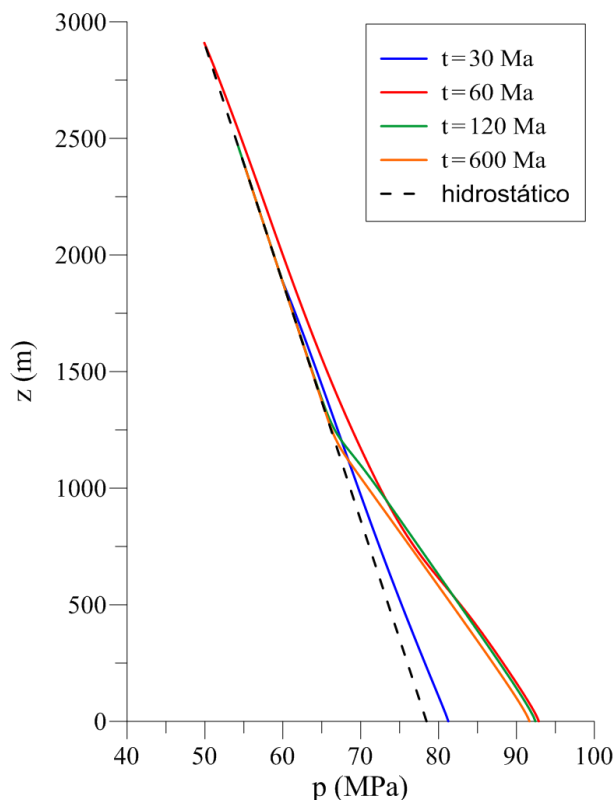


Figura 151: perfil de poro-pressão na bacia (caso 3)

A Figura 152 ilustra os perfis de tensão efetiva média p' . É possível identificar claramente o fenômeno de relaxação que ocorre entre $t = 60$ Ma e $t = 120$ Ma para as camadas compreendidas entre $500 \leq z \leq 1000$ m. Assim como no caso isotérmico, as curvas apresentam uma mudança de comportamento na transição do regime elástico para o regime elasto-plástico próximo às camadas superiores da bacia. No entanto, não se observa nenhuma indicação sobre algum possível efeito das perturbações que foram identificadas na curva de evolução da tensão efetiva horizontal σ'_H na base da bacia.

A Figura 153 apresenta a evolução da tensão efetiva horizontal média Σ'_H na lateral da bacia ao longo do tempo. Nota-se que, com exceção de uma pequena perturbação que ocorre para $t \approx 60$ Ma, o comportamento da curva parece coerente com o que é esperado a partir do que se observa no caso isotérmico. Portanto, a partir de todas as informações analisadas ao longo das análises locais e globais que foram expostas conclui-se que, a priori, a perturbação observada na curva de σ'_H da Figura 131 corresponde a um fenômeno local que não impacta o comportamento global da bacia.

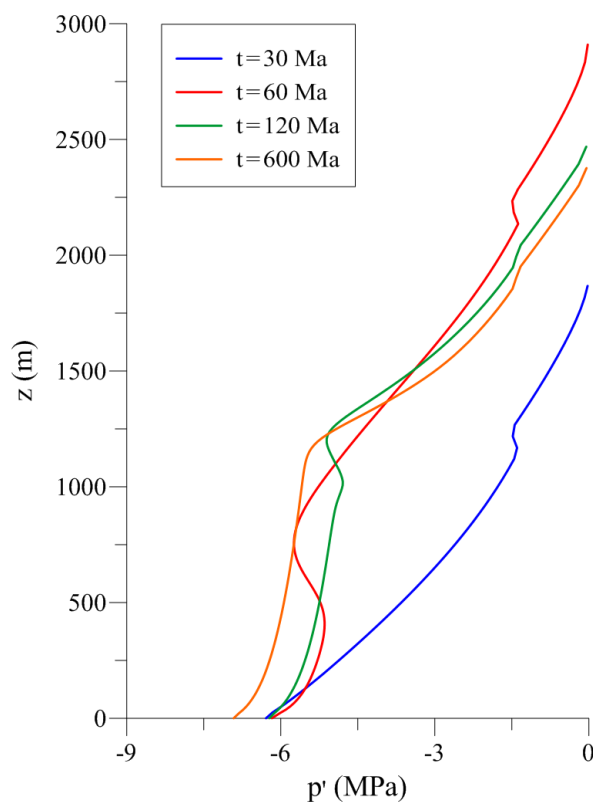


Figura 152: perfil de tensão efetiva média na bacia (caso 3)

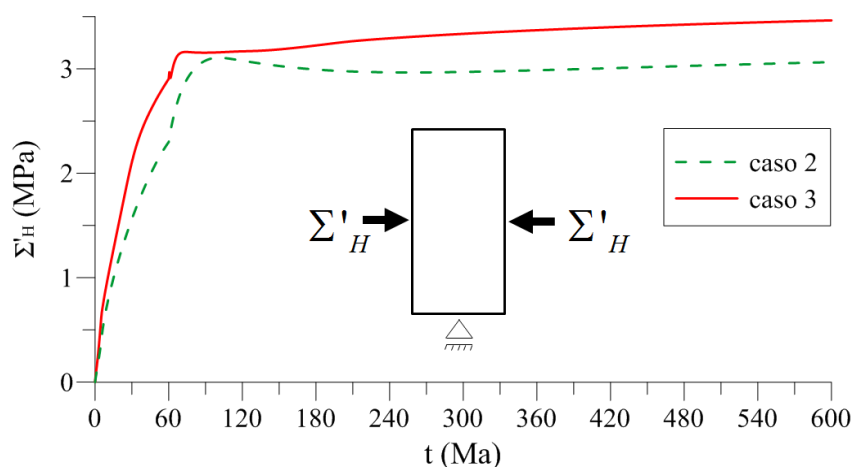


Figura 153: evolução da tensão efetiva horizontal média na lateral da bacia (caso 3)

A Figura 154 apresenta os perfis de coeficiente de difusividade térmica e líquida da bacia. Como os minerais possuem maior condutividade térmica k' que a água, os maiores valores de α são obtidos nas camadas inferiores, onde a porosidade é menor. Já para a condução da massa fluida, os maiores valores de c_m ocorrem para as camadas superiores, nas regiões onde a combinação da porosidade e da temperatura leva a valores mais elevados para permeabili-

dade k^f do material sedimentar. Portanto, como os tempos característicos de difusão térmica e de massa fluida são inversamente proporcionais a α e c_m , respectivamente, tem-se que o passo de tempo numérico do módulo térmico $\delta t_{mín}^t$ é controlado pelos elementos localizados mais próximos à base, enquanto o passo de tempo numérico do módulo poromecânico $\delta t_{mín}^f$ é controlado pelos elementos localizados nas camadas superiores da bacia.

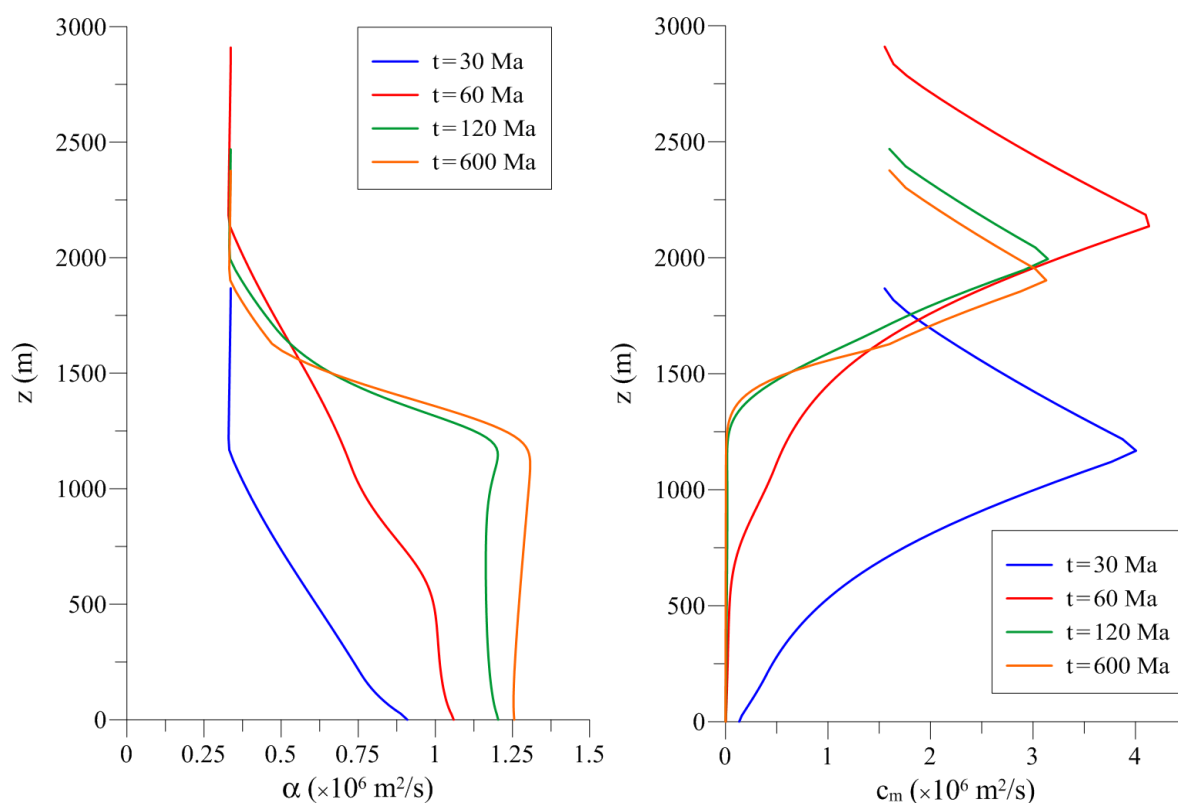


Figura 154: perfil de coeficiente de difusividade térmica e líquida na bacia (caso 3)

A Figura 155 ilustra a evolução do passo de tempo mínimo $\delta t_{mín}^f$ referente à difusão da massa fluida no meio poroso, a Figura 156 apresenta a evolução do passo de tempo mínimo $\delta t_{mín}^{vp}$ referente às deformações viscoplásticas do esqueleto e a Figura 157 mostra a evolução do passo de tempo mínimo $\delta t_{mín}^t$ referente ao problema de condução térmica. Estes valores são obtidos por meio de uma varredura em todos os elementos da malha da bacia, que busca os menores passos de tempo Δt_{ref}^f , Δt_{ref}^{vp} e Δt_{ref}^t , definidos pelas expressões (275), (278) e (271), respectivamente. O menor valor para o passo de tempo de referência associado às deformações viscoplásticas ocorre para $t = 600$ Ma, $\Delta t_{ref}^{vp} = 4030.5$ anos, confirmando que no pro-

blema proposto o passo de tempo do módulo poromecânico é controlado pelo fenômeno de difusão da massa fluida, já que se tem $\delta t_{\min}^{vp} \gg \delta t_{\min}^f$ ao longo de toda a análise.

Em comparação à análise isotérmica, verifica-se que os valores obtidos para o passo de tempo δt_{\min}^f foram menores devido ao efeito da temperatura sobre a lei de permeabilidade do material. Portanto, além do custo computacional adicional relativo à execução do módulo térmico e comunicação com o módulo poromecânico, a análise não-isotérmica da bacia teve impacto expressivo sobre o passo de tempo do módulo poromecânico, levando a um aumento significativo no número de passos de tempo da análise e, conseqüentemente, no custo computacional total. Isto demonstra que as dificuldades enfrentadas ao acoplar diferentes fenômenos para solução de um determinado problema não estão associadas unicamente ao desenvolvimento de um modelo físico coerente, mas também de uma ferramenta computacional eficiente.

As curvas apresentadas indicam que o passo de tempo mínimo do problema térmico é inicialmente superior ao do problema poromecânico. Porém, como é controlado pelo elemento localizado na base da bacia, o passo de tempo δt_{\min}^t segue diminuindo ao longo da análise conforme o processo de compactação avança. A evolução do número inteiro N definido em (284) para corrigir o passo de tempo δt_t utilizado no módulo térmico em função do passo de tempo δt_{UP} utilizado no módulo poromecânico está ilustrada na Figura 158. Observa-se que quando $\delta t_{\min}^t > \delta t_{\min}^f$ tem-se $N = 1$ e quando $\delta t_{\min}^t < \delta t_{\min}^f$ utiliza-se $N > 1$ para ajustar o avanço do módulo térmico e facilitar sua sincronização com o módulo poromecânico.

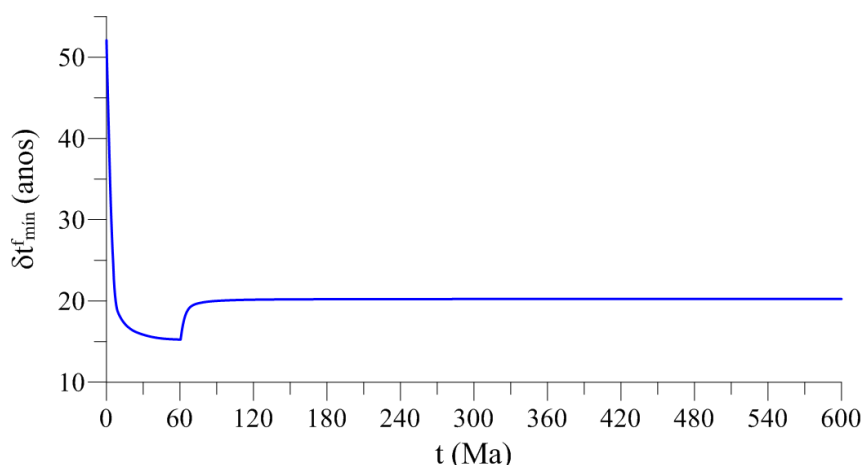


Figura 155: evolução do passo de tempo δt_{\min}^f ao longo da análise (caso 3)

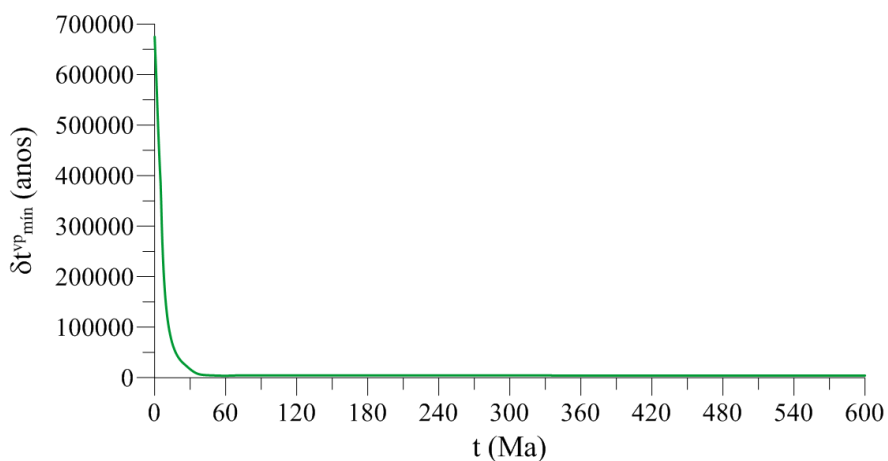


Figura 156: evolução do passo de tempo δt_{\min}^{vp} ao longo da análise (caso 3)

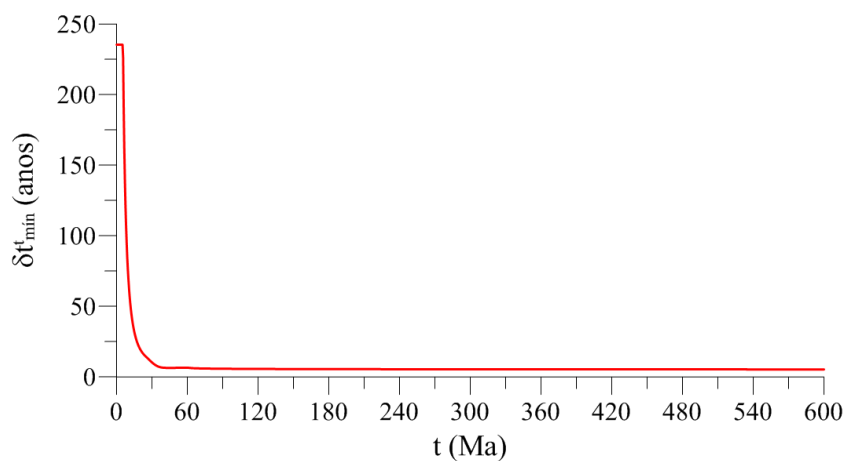


Figura 157: evolução do passo de tempo δt_{\min}^t ao longo da análise (caso 3)

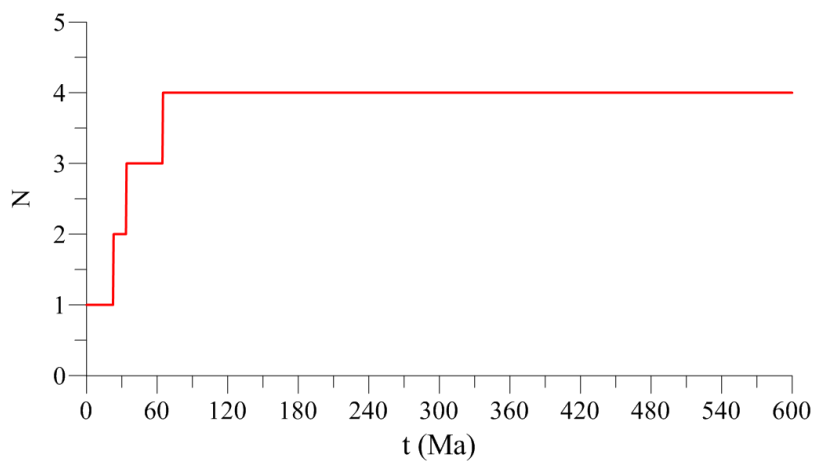


Figura 158: evolução do número inteiro N ao longo da análise (caso 3)

6.1.3 Caso 3: análise paramétrica

Para melhor compreender o impacto dos efeitos da temperatura sobre os processos de deformação mecânica e químico-mecânica da bacia, duas novas análises são realizadas para diferentes valores de fluxo prescrito $q^{t,d}$ na sua base: 50 e 90 mW/m². Estes valores são mantidos fixos no decorrer de toda a simulação. Os demais dados do problema permaneceram inalterados. Os resultados são comparados com o que foi obtido para $q^{t,d} = 70$ mW/m² ao longo da análise original. As análises foram realizadas com malhas de 60 elementos regularmente distribuídos ao longo da espessura da bacia e $\beta^f = \beta^t = 10$.

As leis de compactação gravitacional estão apresentadas na Figura 159, onde é possível observar que a bacia submetida ao maior fluxo térmico, $q^{t,d} = 90$ mW/m², obteve maior taxa de compactação. Para os fluxos de 50, 70 e 90 mW/m², o valor obtido para a altura da bacia ao fim da fase de deposição sedimentar $H(T_{sed} = 60 \text{ Ma})$ é de 3013.3, 2928.2 e 2868.6 metros, que correspondem às deformações de 49.7%, 51.2% e 52.2%, respectivamente. As diferenças nos valores das curvas de compactação são mais significativas entre $T_{sed}/2 \leq t \leq 2T_{sed}$. Ao fim da análise, $t = 10T_{sed}$, os valores obtidos são praticamente os mesmos para todos os casos.

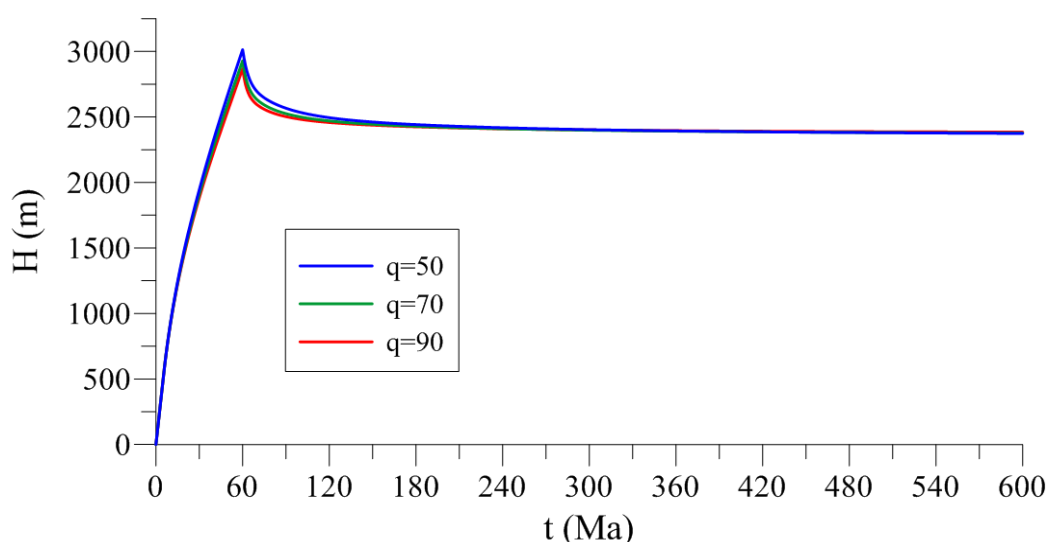


Figura 159: leis de compactação gravitacional da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

6.1.3.1 Fluxo térmico: análise local

A evolução da temperatura na base da bacia está ilustrada na Figura 160. Para os fluxos térmicos de 50, 70 e 90 mW/m², as temperaturas atingidas para $t=60$ Ma são de 89.6°C, 122.7°C e 156.2°C, e para $t=600$ Ma de 60.6°C, 86.9°C e 114.8°C, respectivamente.

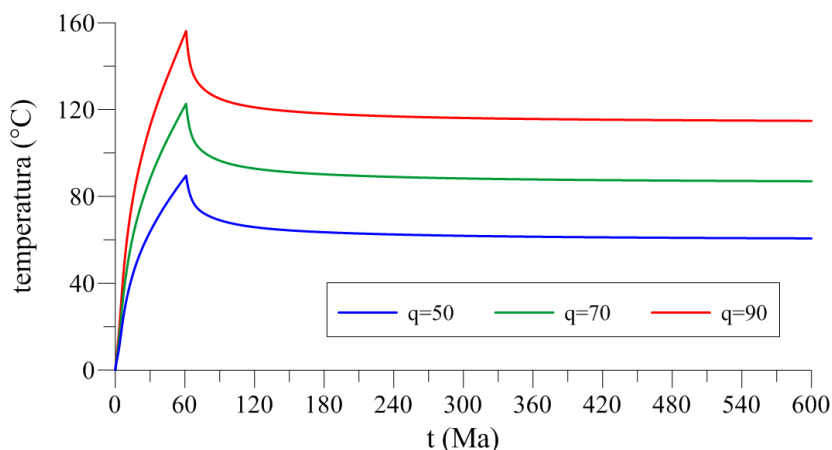


Figura 160: evolução da temperatura na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

A Figura 161 e a Figura 162 apresentam a norma da taxa de deformação plástica e viscoplástica na base da bacia. As camadas submetidas às maiores temperaturas apresentam os maiores picos de $\underline{\underline{d}}^p$ e $\underline{\underline{d}}^{vp}$, que ocorrem para diferentes momentos de acordo com a história térmica da bacia. No entanto, pode-se observar que o impacto da temperatura é muito maior sobre a taxa de deformação viscoplástica $\underline{\underline{d}}^{vp}$ do que sobre a taxa de deformação plástica $\underline{\underline{d}}^p$.

Conforme os sedimentos são aquecidos, a viscosidade da água η^f e o coeficiente de viscosidade viscoplástico η_{vp} evoluem, modificando as características do escoamento e a magnitude das taxas de deformação. Em consequência disso, o instante em que ocorre a transição do regime elasto-viscoplástico-plástico para o regime elasto-viscoplástico também é modificado. Para os fluxos térmicos de 50, 70 e 90 mW/m², o fim do incremento de deformação plástica, $\underline{\underline{d}}^p = 0$, ocorre aos 27, 24 e 23 milhões de anos, respectivamente.

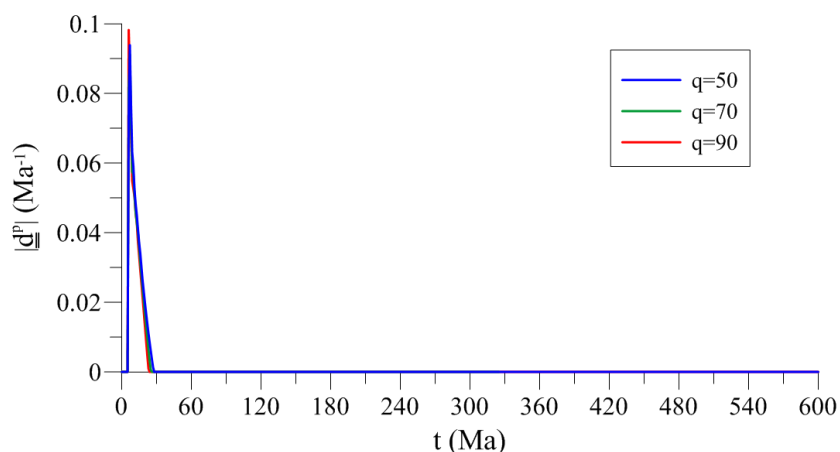


Figura 161: evolução da norma da taxa de deformação plástica na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

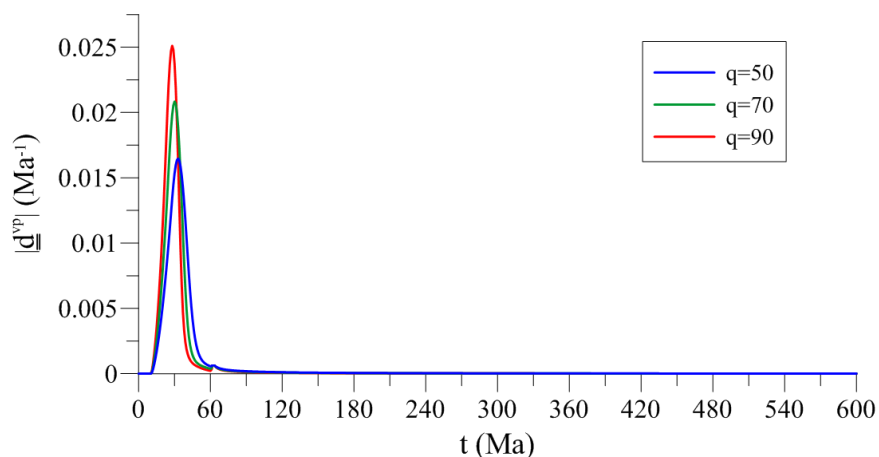


Figura 162: evolução da norma da taxa de deformação viscoplástica na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

A Figura 163 e a Figura 164 apresentam a evolução da tensão efetiva vertical e horizontal na base da bacia. Verifica-se que o período em que o fenômeno de relaxação é dominante começa mais cedo para a bacia submetida ao maior fluxo térmico. A análise destas curvas em conjunto com as curvas de temperatura da Figura 160 demonstra que a magnitude da perturbação e do salto que ocorre em $t = 60$ Ma nas curvas de tensão efetiva vertical e horizontal é proporcional ao nível de temperatura em que o material sedimentar foi submetido. Isto é confirmado nas curvas de coeficiente K_0 da Figura 165, onde o período em que o comportamento das curvas é significativamente afetado pelas tensões efetivas horizontais de origem térmica é mais curto para a bacia que foi submetida ao menor fluxo térmico, assim como o salto que ocorre ao fim da fase de deposição.

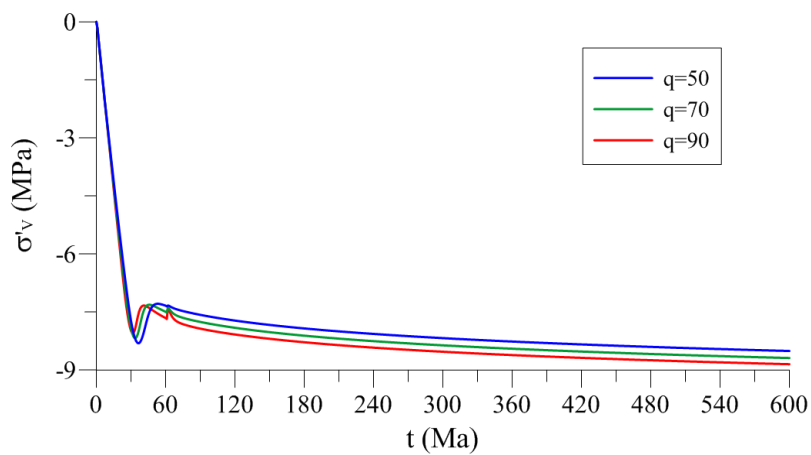


Figura 163: σ'_v na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

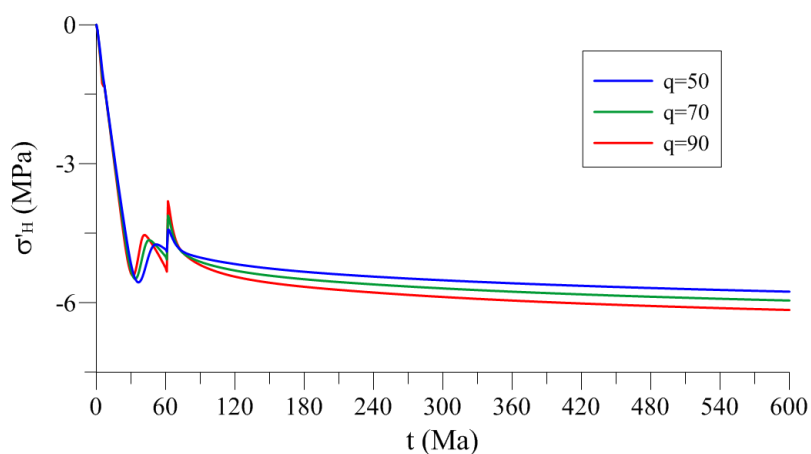


Figura 164: σ'_H na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

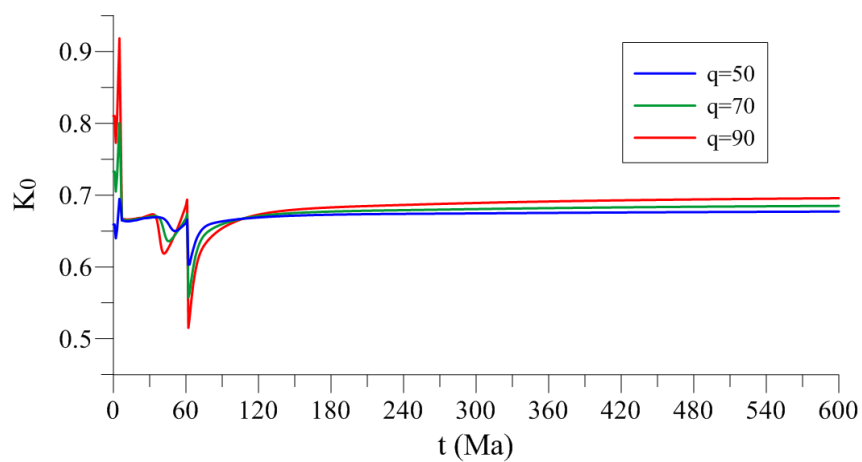


Figura 165: K_0 na base da bacia para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

6.1.3.2 Fluxo térmico: análise global

A Figura 166 apresenta o perfil de temperatura da bacia ao fim da fase de deposição sedimentar, $t = 60$ Ma, para os diferentes valores de fluxo térmico adotados. As diferenças na distribuição de temperaturas obtidas para cada caso demonstram o papel fundamental que o fluxo térmico terrestre tem na geração de hidrocarbonetos, pois sua variação ao longo da história da bacia pode alterar significativamente as temperaturas na rocha geradora. A variação média da temperatura ao longo da profundidade $T(z=0)/H(t)$ para os fluxos de 50, 70 e 90 mW/m^2 é de 29.7, 41.9, e 54.4°C/km, respectivamente.

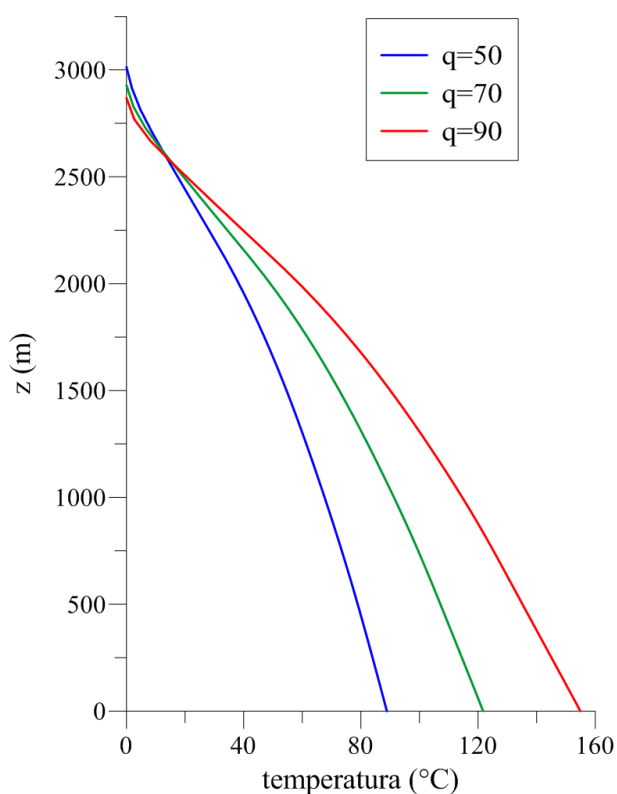


Figura 166: perfil de temperatura na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

A Figura 167 ilustra o perfil de Jacobiano irreversível da transformação para os diferentes casos investigados em $t = 60$ Ma, onde é possível observar que a bacia submetida ao maior fluxo térmico apresenta os menores valores de J^{ir} ao longo da sua profundidade. Os perfis de Jacobiano plástico e viscoplástico estão apresentados na Figura 168. Assim como foi demonstrado na investigação local desta análise paramétrica, pode-se ver claramente que o impacto da temperatura é muito maior sobre a taxa de deformação viscoplástica $\underline{\underline{d}}^{vp}$ do que sobre a taxa de deformação plástica $\underline{\underline{d}}^p$, pois enquanto os perfis de J^p encontram-se muito próximos uns dos outros, as curvas de J^{vp} encontram-se visivelmente mais distantes. A figura demonstra que os menores valores de J^p foram obtidos para o menor fluxo térmico, enquanto que os menores valores de J^{vp} foram obtidos para o maior fluxo térmico.

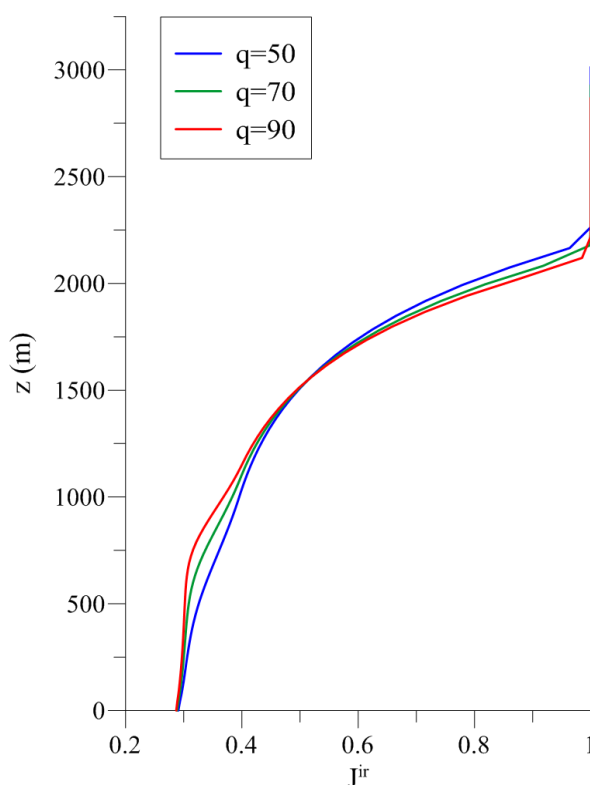


Figura 167: perfil de Jacobiano irreversível na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

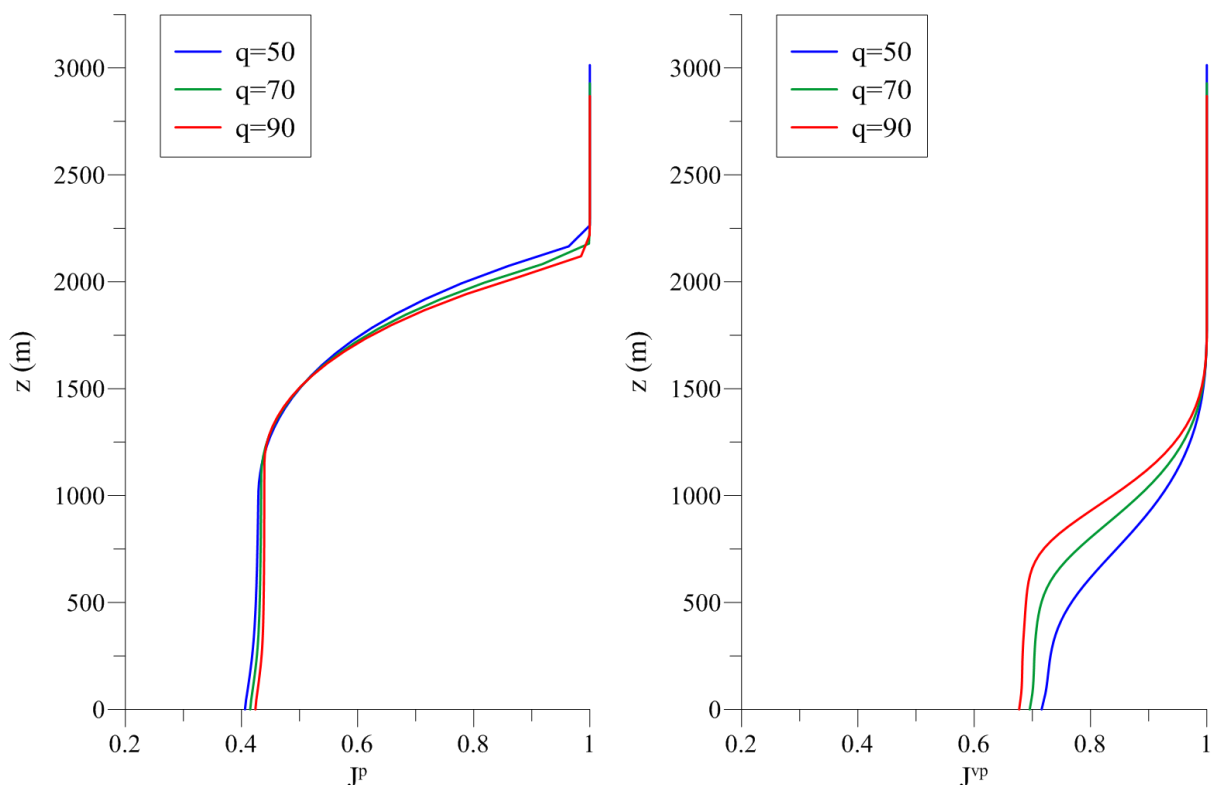


Figura 168: perfil de Jacobiano plástico e viscoplástico na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

A influência que o fluxo térmico e a evolução da temperatura têm sobre a taxa de compactação da bacia e a evolução do Jacobiano irreversível da transformação também pode ser demonstrada através dos perfis de porosidade apresentados na Figura 169, onde fica claro que a bacia que recebeu maior quantidade de calor ao longo da sua história de formação é a que apresenta o menor perfil de porosidade. Por outro lado, a Figura 170 indica que a variação do fluxo térmico não tem efeito significativo sobre a distribuição de poro-pressão na bacia.

A Figura 171 apresenta o perfil de tensão efetiva média na bacia em $t = 60$ Ma para os diferentes valores de fluxo térmico adotados. Estas curvas permitem identificar a evolução do fenômeno de relaxação das tensões efetivas ao longo da profundidade da bacia, que ocorre para diferentes momentos e com diferentes intensidades de acordo com a história térmica da bacia. Para o instante representado, a bacia submetida ao maior fluxo térmico apresenta o menor valor para tensão efetiva média na sua base, enquanto que nas camadas localizadas entre $z \approx 250$ m e $z \approx 750$ m o fenômeno de relaxação faz com que esta bacia apresente tensões efetivas médias maiores que as demais.

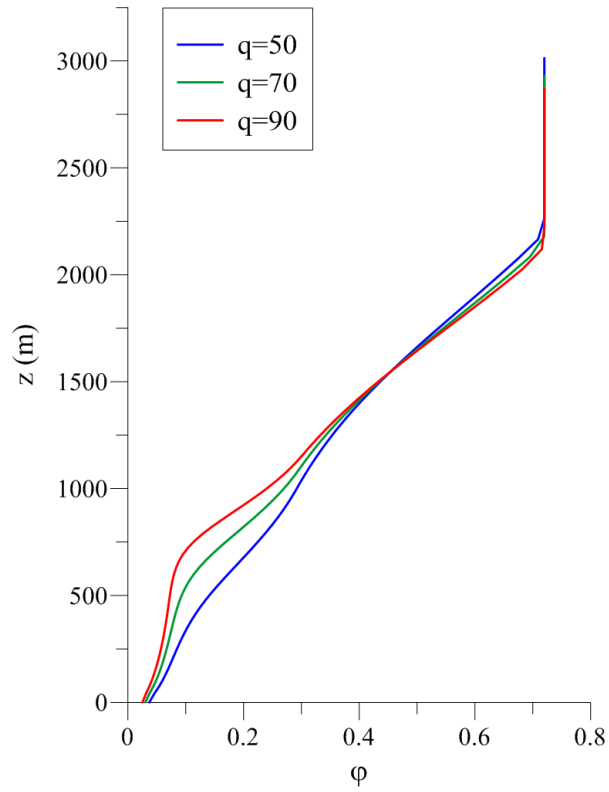


Figura 169: perfil de porosidade na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

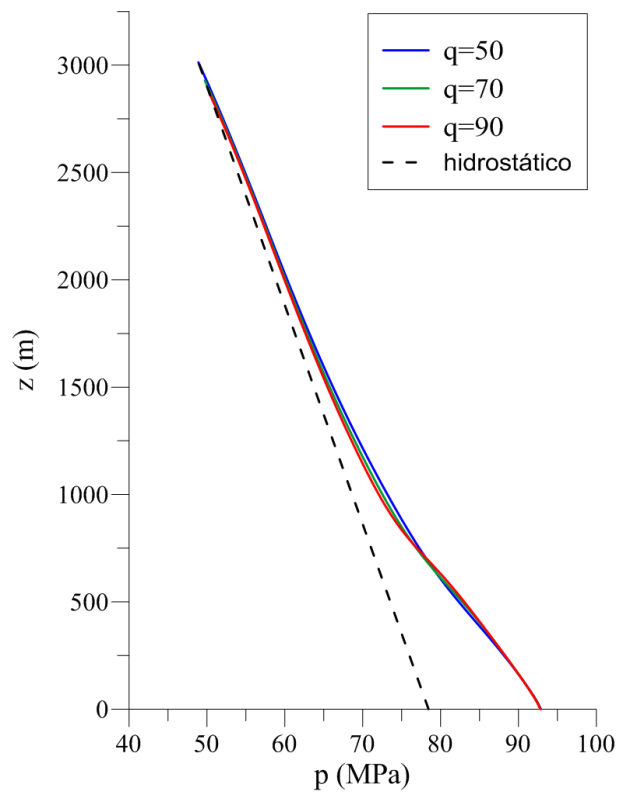


Figura 170: perfil de poro-pressão na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

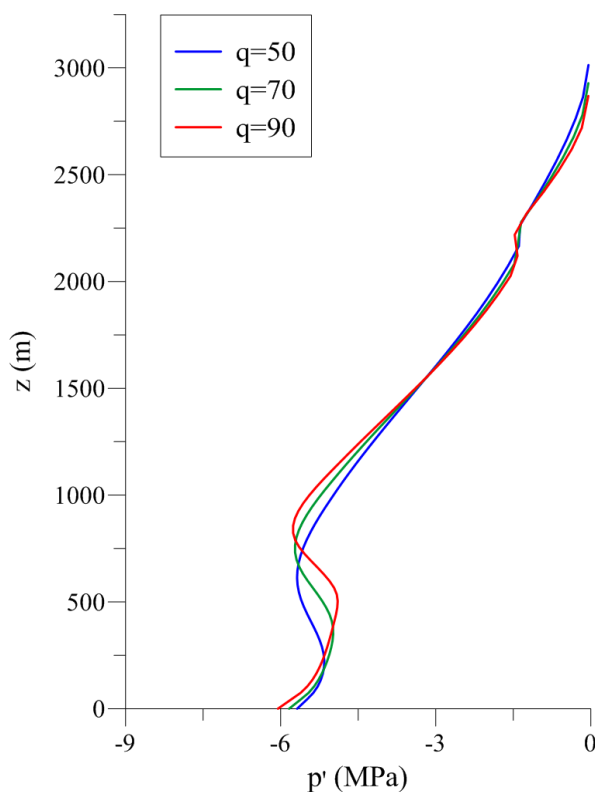


Figura 171: perfil de tensão efetiva média na bacia em $t=60$ Ma para diferentes valores de fluxo prescrito (caso 3)

A incorporação de leis que descrevem a evolução de parâmetros fundamentais no comportamento do material sedimentar em função da temperatura, como a viscosidade da água e o coeficiente de viscosidade viscoplástica tem grande impacto sobre a história de compactação da bacia em condições não-isotérmicas. Por um lado, a evolução da viscosidade da água afeta a permeabilidade das camadas, o que facilita a dissipação do excesso de poro-pressão e o processo de transferência de carga do fluido para o esqueleto do material poroso, aumentando a taxa de compactação mecânica da bacia. Por outro lado, a evolução do coeficiente de viscosidade viscoplástica leva a maiores taxas de compactação químico-mecânica, que resulta em maior relaxação das tensões efetivas do material e antecipa a transição do regime elasto-plástico-viscoplástico para o regime elasto-viscoplástico. Os diferentes fluxos térmicos adotados neste estudo paramétrico proporcionaram diferentes histórias de temperatura para a bacia, o que possibilitou uma melhor compreensão dos efeitos térmicos sobre os diferentes fenômenos envolvidos na modelagem computacional de bacias sedimentares.

6.2 EXEMPLO ILUSTRATIVO DE UM PROBLEMA TRIDIMENSIONAL

A fim de ilustrar a capacidade da ferramenta computacional em simular problemas de evolução 3D, um problema de compactação gravitacional referente a uma situação puramente acadêmica é proposto com uma história de deposição sedimentar heterogênea ao longo do plano horizontal da bacia, que resulta em uma estratigrafia com espessuras variáveis. A formação da bacia é dividida em quatro períodos de acordo com a equação (340), que fornece uma taxa de deposição sedimentar \dot{M}_d variável ao longo do seu plano horizontal XY , mas constante no tempo para cada intervalo considerado.

$$\dot{M}_d = ax + by + c \quad (340)$$

As coordenadas x e y da expressão (340) devem ser fornecidas em km e a taxa de deposição sedimentar é obtida em ton/km² por ano. A Tabela 4 apresenta as propriedades dos períodos de formação da bacia, onde t_i e t_f são, respectivamente, o instante inicial e final de cada período considerado, T_{sed} é o tempo total de deposição sedimentar do período, c é uma constante que fornece o valor de \dot{M}_d para $x = y = 0$ e a e b são coeficientes que descrevem a variação da taxa de deposição sedimentar ao longo do plano horizontal da bacia.

Tabela 4: propriedades dos períodos de formação da bacia (3D)

<i>período</i>	t_i	t_f	T_{sed}	a	b	c
1	0	10	10	-2.05	-1.37	208.24
2	10	22	12	-1.71	-1.14	167.83
3	22	32	10	-2.05	-1.37	139.74
4	32	40	8	-2.57	-1.71	183.24

A massa total de sedimentos depositada ao longo de cada intervalo $T_{sed} = t_f - t_i$ pode ser obtida por meio da integração da taxa de deposição sedimentar ao longo do domínio geométrico considerado ($x_i \leq x \leq x_f$; $y_i \leq y \leq y_f$) e do tempo de duração correspondente $t_i \leq t \leq t_f$.

$$m = \int_{t_i}^{t_f} \int_{y_i}^{y_f} \int_{x_i}^{x_f} \dot{M}_d \, dx dy dt \quad (341)$$

Se na equação (341) o integrando \dot{M}_d for dividido pela massa específica inicial dos sedimentos ρ_0 , tem-se o volume total de material depositado:

$$V = \int_{t_i}^{t_f} \int_{y_u}^{y_f} \int_{x_i}^{x_f} \frac{\dot{M}_d}{\rho_0} dx dy dt \quad (342)$$

A taxa de acréscimo de sedimentos média $\dot{\mathcal{H}}_{\text{médio}}$ para cada período de formação da bacia pode ser obtida de acordo com a expressão (343):

$$\dot{\mathcal{H}}_{\text{médio}} = \frac{\int_{y_u}^{y_f} \int_{x_i}^{x_f} \frac{\dot{M}_d}{\rho_0} dx dy}{\int_{y_u}^{y_f} \int_{x_i}^{x_f} dx dy} \quad (343)$$

As condições de contorno do problema poromecânico correspondem à Figura 58 e às expressões (331) a (334), com a diferença que o nível do mar encontra-se na cota $L_0 = 6000$ m. As condições de contorno do problema térmico correspondem à Figura 120 e às expressões (336) a (339). Todas as propriedades termoporomecânicas do material são exatamente as mesmas adotadas ao longo dos capítulos 5 e 6. Portanto, as únicas diferenças no problema proposto em relação aos problemas anteriores são o nível do mar e a história de deposição dos sedimentos.

O domínio geométrico adotado para simular o problema de compactação gravitacional da bacia é de $0 \leq x \leq 24$ km, $0 \leq y \leq 18$ km. O assoalho oceânico correspondente à base da bacia está localizado em $z = 0$. A Tabela 5 apresenta a massa e o volume total de material depositado para cada período, assim como as taxas de acréscimo de sedimentos médias $\dot{\mathcal{H}}_{\text{médio}}$.

Tabela 5: características dos períodos de formação da bacia (3D)

<i>período</i>	<i>massa</i> (ton)	<i>volume</i> (km ³)	$\dot{\mathcal{H}}_{\text{médio}}$ (m/Ma)
1	7.4×10^{11}	540	125
2	7.1×10^{11}	518.4	100
3	4.44×10^{11}	324	75
4	4.74×10^{11}	345.6	100

Recorda-se que no algoritmo de deposição sedimentar a história de deposição da bacia já deve estar prevista na malha inicial, e que a partir das condições iniciais e de contorno aplicadas, os elementos não-ativados não afetam a evolução termoporomecânica das camadas depositadas (elementos ativados). A Figura 172 mostra a malha inicial da bacia, assim como a previsão das camadas que serão depositadas ao longo da sua história de formação $0 \leq T_{sed} \leq 40 \text{ Ma}$. O ponto O indica a origem dos eixos coordenados. Os volumes associados a cada período de deposição estão representados em diferentes cores. A Tabela 6 fornece as coordenadas em km dos vértices que compõe a superfície superior de cada volume na malha inicial.

A bacia é dividida de maneira uniforme em 16 elementos na direção x e 12 elementos na direção y . Ao longo da direção vertical z , os volumes 1 e 2 são divididos uniformemente em 10 elementos cada, e os volumes 3 e 4 em 5 elementos cada. A malha resultante é de $16 \times 12 \times 30$, que corresponde a 5760 elementos, 26253 nós e 85610 graus de liberdados para o problema poromecânico, e 6851 nós e graus de liberdade para o problema térmico.

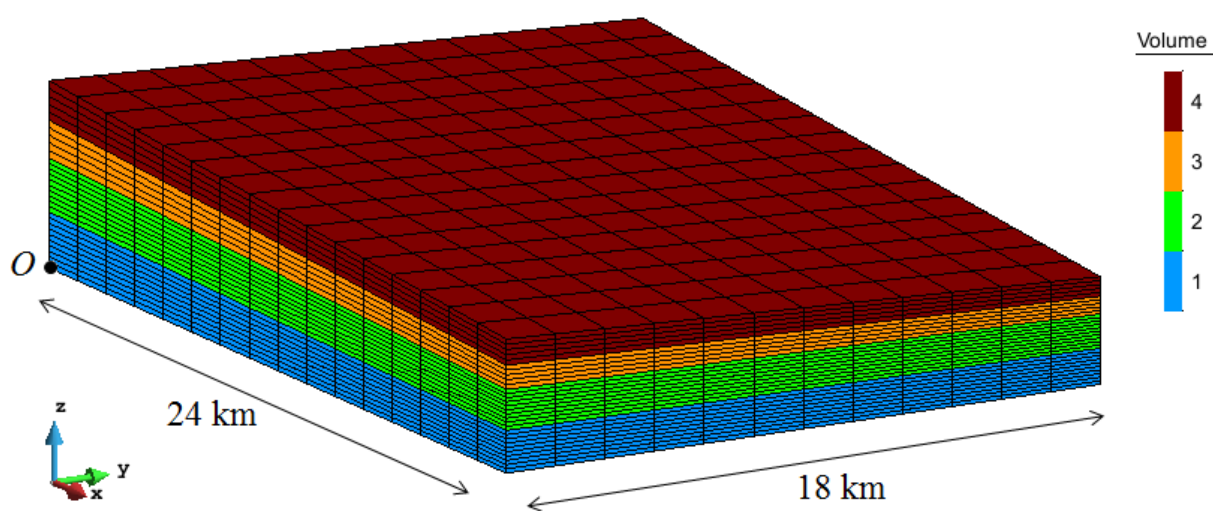


Figura 172: malha inicial (3D)

Tabela 6: coordenadas dos vértices da superfície superior de cada camada (3D)

<i>volume</i>	$x = 0; y = 0$	$x = 24; y = 0$	$x = 24; y = 18$	$x = 0; y = 18$
1	$z = 1.52$	$z = 1.16$	$z = 0.98$	$z = 1.34$
2	$z = 2.99$	$z = 2.27$	$z = 1.91$	$z = 2.63$
3	$z = 4.01$	$z = 2.93$	$z = 2.39$	$z = 3.47$
4	$z = 5.08$	$z = 3.64$	$z = 2.92$	$z = 4.36$

A simulação do problema proposto é realizada para o intervalo de tempo $0 \leq t \leq T_{sed} = 40 \text{ Ma}$. Com o propósito de se obter mais informações a respeito da discretização espacial e temporal, um estudo foi realizado para o problema de compactação da bacia em condições isotérmicas. O motivo de se realizar este estudo com o módulo térmico desativado foi de economia de tempo de processamento, já que o problema não-isotérmico leva muito mais tempo para ser calculado em relação ao problema isotérmico, pois além dos cálculos adicionais referentes à evolução das temperaturas na bacia, a incorporação dos efeitos térmicos sobre o comportamento do material sedimentar reduz o passo de tempo do módulo poromecânico.

O primeiro estudo realizado diz respeito à discretização espacial na direção vertical z . Este estudo foi realizado com $\beta^f = 10$ para 20, 30, 40 e 50 elementos ao longo da espessura da bacia. Os resultados estão apresentados na Tabela 7 para a altura da bacia nas coordenadas $(x = 0; y = 0)$ ao fim da fase de deposição sedimentar, $H(t = T_{sed} = 40 \text{ Ma})$. Embora os valores obtidos tenham diferenças na ordem de dezenas de metros, o erro relativo entre as malhas com 30 e 50 elementos na direção vertical é de aproximadamente 1.6%, enquanto a diferença no tempo de processamento foi significativamente maior.

Estudos referentes à discretização espacial nas direções x e y também foram realizados. Embora os elementos utilizados apresentem fator de forma muito elevado em relação à direção z , o que não é recomendado no contexto do método dos elementos finitos para evitar eventuais problemas numéricos associados à precisão dos resultados, a variação dos valores obtidos para malhas mais refinadas no plano horizontal da bacia foi pequena. Sendo assim, optou-se por utilizar a malha de $16 \times 12 \times 30$ elementos para as simulações numéricas propostas, que corresponde a elementos com lados iniciais $l_x = l_y = 1.5 \text{ km}$.

Tabela 7: solução isotérmica para diferentes discretizações espaciais (3D)

Propriedades da malha				$H(t = T_{sed})$
<i>malha</i>	<i>elementos</i>	<i>nós</i>	<i>gdl</i>	$\beta^f = 10$
16×12×20	3840	17713	57780	3254.4
16×12×30	5760	26253	85610	3175.2
16×12×40	7680	34793	113440	3149.3
16×12×50	9600	43333	141270	3124.1

Uma vez escolhida a malha de elementos finitos, realizou-se o estudo da discretização temporal para diferentes valores de β^f : 0.5, 1, 5 e 10. Os resultados estão mostrados na Tabela 8. O erro relativo entre o problema com $\beta^f = 0.5$ e $\beta^f = 10$ foi de aproximadamente 1%. No entanto, este estudo em condições isotérmicas serve apenas como informação complementar, pois como mostra a Tabela 3 para as simulações não-isotérmicas, os efeitos da temperatura sobre o comportamento poromecânico do material fez com que os resultados obtidos ao fim da fase de deposição sedimentar fossem praticamente iguais para os diferentes valores de β^f e β^t adotados. Portanto, os resultados apresentados a seguir correspondem à malha de $16 \times 12 \times 30$ elementos e coeficientes $\beta^f = \beta^t = 10$.

Tabela 8: solução isotérmica para diferentes discretizações temporais (3D)

Propriedades da malha			$H(t = T_{sed})$			
<i>elementos</i>	<i>nós</i>	<i>gdl</i>	$\beta^f = 0.5$	$\beta^f = 1$	$\beta^f = 5$	$\beta^f = 10$
16×12×30	26253	85610	3142.0	3142.2	3152.2	3175.2

A Figura 173 ilustra a malha deformada da bacia ao fim de cada período juntamente com as cores das camadas depositadas. As regiões que apresentam cor associada à camada 0 correspondem aos elementos que ainda não foram ativados. As linhas que delimitam o domínio geométrico de cada elemento foram retiradas para facilitar a visualização dos resultados, restando apenas as linhas que delimitam os volumes correspondentes aos períodos de deposição.

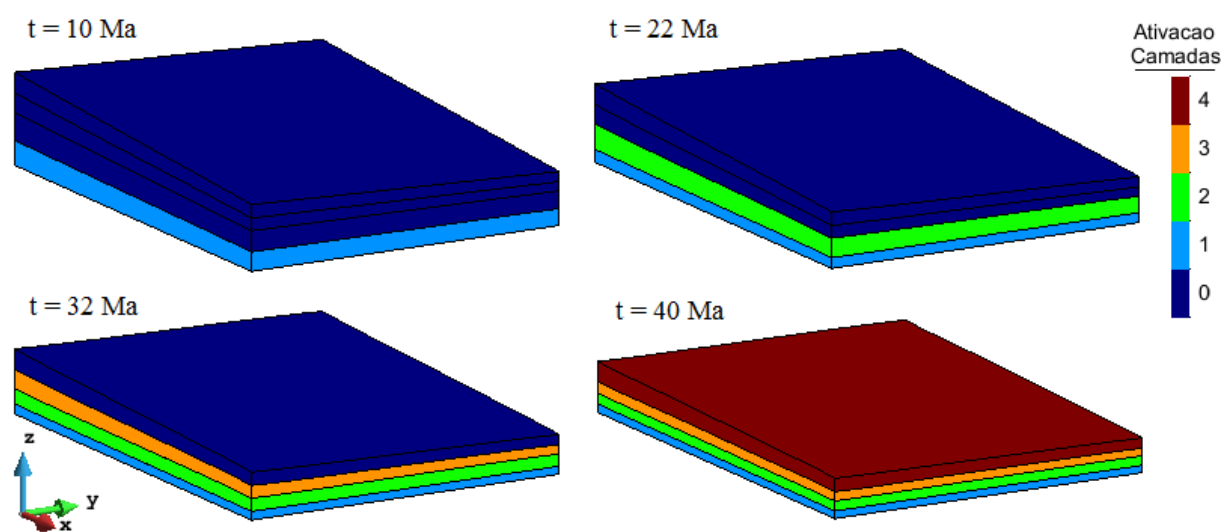


Figura 173: ativação das camadas de sedimentos (3D)

Os deslocamentos nas direções x , y e z ao fim do período de formação da bacia $t = 40$ Ma estão apresentados na Figura 174, Figura 175 e Figura 176, respectivamente. Os valores das legendas estão em metros. Para permitir a visualização dos resultados no interior da bacia, removeu-se o volume delimitado por $6 \leq x \leq 24$ km e $0 \leq y \leq 12$ km. Observa-se que os deslocamentos horizontais foram muito pequenos. Isto ocorreu devido à história de deposição sedimentar adotada, que resultou em inclinações muito pequenas entre as camadas da bacia.

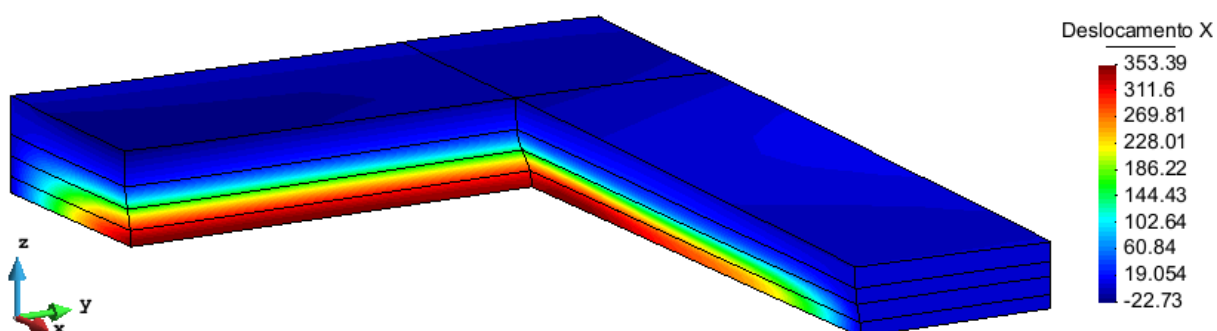


Figura 174: deslocamentos na direção x para $t=40$ Ma (3D)

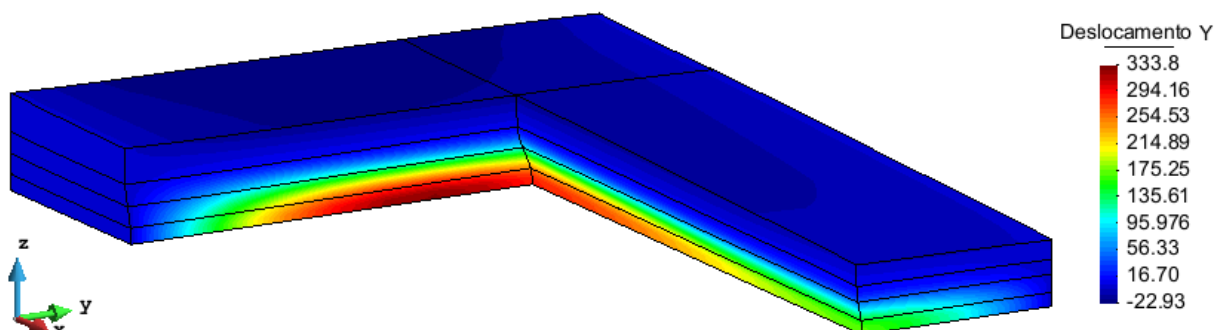


Figura 175: deslocamentos na direção y para $t=40$ Ma (3D)

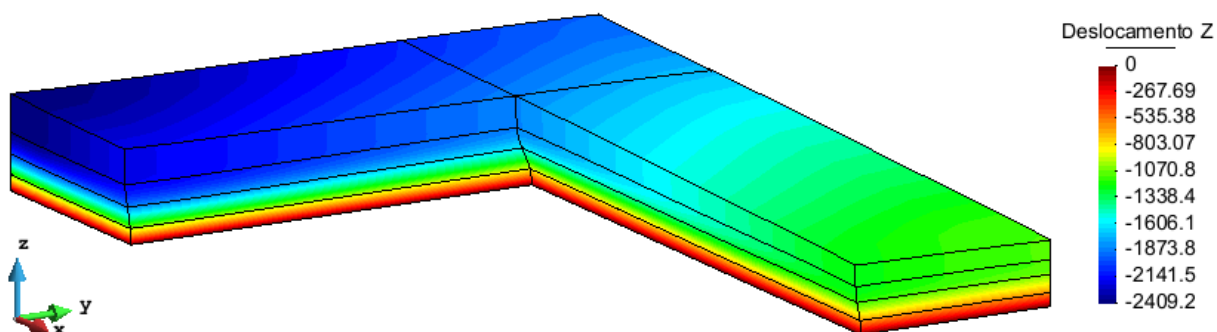


Figura 176: deslocamentos na direção z para $t=40$ Ma (3D)

As distribuições de porosidade, temperatura, poro-pressão e tensão efetiva média na bacia para $t = 40$ Ma estão representadas na Figura 177, Figura 178, Figura 179 e Figura 180. Pode-se observar a diferença nos campos destes parâmetros ao longo de todas as direções. Os valores de φ , T , p e p' em $(x=0; y=0; z=0)$ foram 2%, 107.5°C, 68 MPa e -4.5 MPa, enquanto que para $(x=24 \text{ km}; y=18 \text{ km}; z=0)$ obteve-se 6%, 85°C, 64 MPa e -7 MPa.

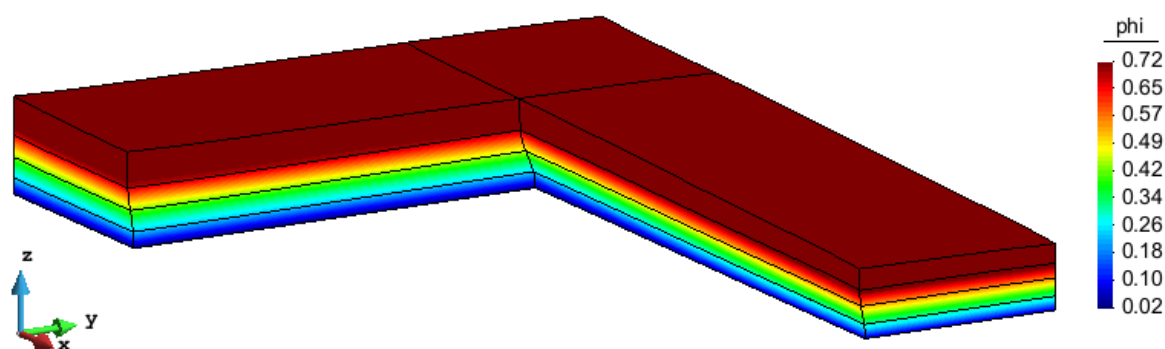


Figura 177: distribuição de porosidade para $t=40$ Ma (3D)

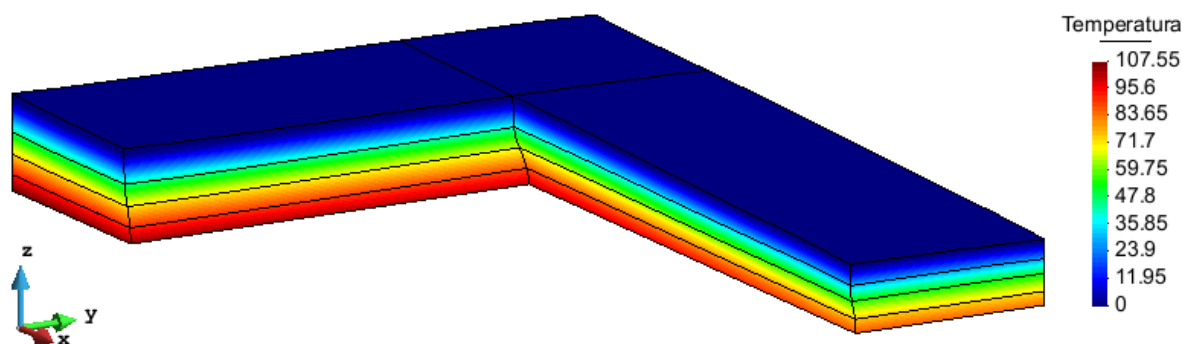


Figura 178: distribuição de temperatura para $t=40$ Ma (3D)

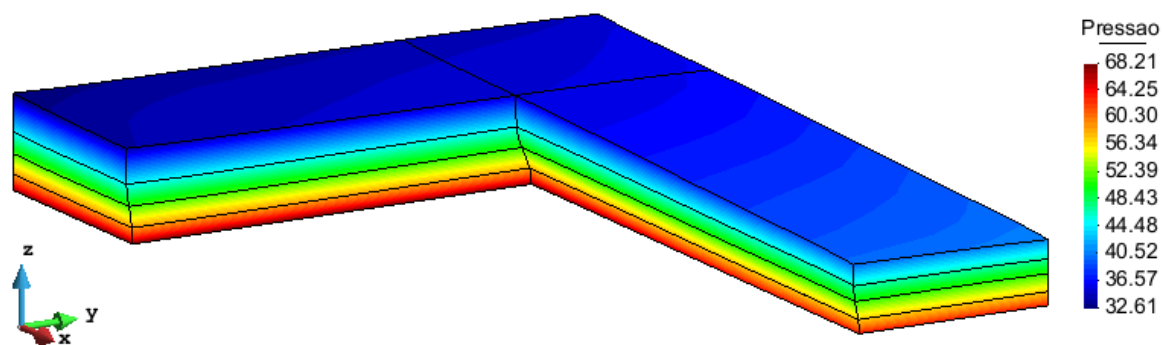


Figura 179: distribuição de poro-pressão para $t=40$ Ma (3D)

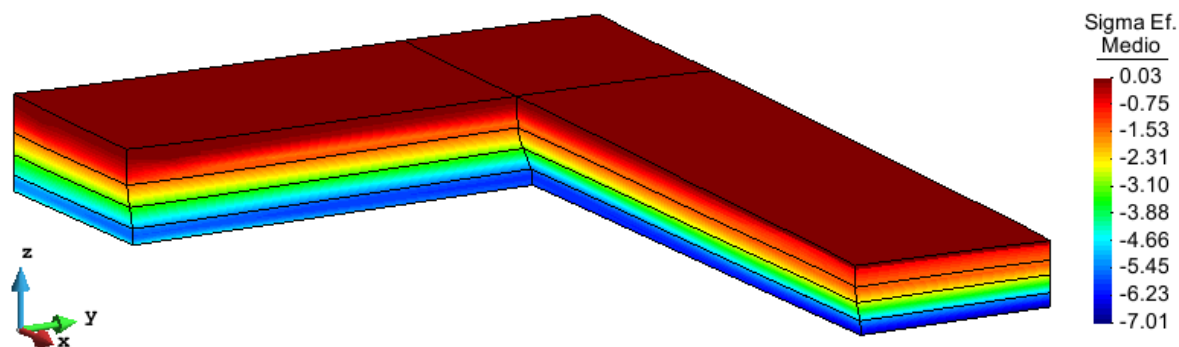


Figura 180: distribuição de tensão efetiva média para $t=40$ Ma (3D)

O objetivo deste problema proposto foi de demonstrar a capacidade da ferramenta computacional desenvolvida de tratar com problemas de natureza tridimensional, já que nos exemplos anteriores, embora simulado por meio de uma ferramenta 3D, os problemas de compactação gravitacional da coluna sedimentar com camadas estratigráficas paralelas em condições oedométricas eram de natureza unidimensional. Para ilustrar o problema da forma mais simples possível, as únicas diferenças em relação ao que foi apresentado anteriormente foram o nível do mar e a história de deposição dos sedimentos. De acordo com o que foi observado, a variação das camadas estratigráficas ao longo dos eixos horizontais levou a variações espaciais significativas dos parâmetros termoporomecânicos da bacia.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo apresenta as conclusões sobre o que foi desenvolvido e investigado, e também sugestões para trabalhos futuros a respeito da modelagem teórica e computacional dos processos de formação e deformação de bacias sedimentares.

7.1 CONCLUSÕES

A partir do modelo constitutivo já existente para representar o comportamento de um material sedimentar sujeito a deformações puramente mecânicas, novos elementos foram adicionados para incorporar as deformações de natureza químico-mecânica que ocorrem devido a processos de pressão-solução intergranular (*IPS*). O modelo original é definido no âmbito da poroplasticidade finita para materiais saturados por um único fluido, e leva em conta a evolução das propriedades poromecânicas associada às mudanças de caráter irreversível que ocorrem na sua microestrutura. Para o comportamento plástico do material é utilizado o modelo de Cam-Clay modificado em conjunto com uma lei de encruamento logarítmica desenvolvida segundo uma abordagem micromecânica que evita o desenvolvimento de porosidades negativas quando este é submetido a altos níveis de tensão confinante.

As deformações químico-mecânicas foram introduzidas no modelo constitutivo por meio de termos viscoplásticos adicionados às equações de estado do material. O modelo de Cam-Clay modificado também é adotado para a viscoplasticidade. A lei de encruamento logarítmica foi obtida mediante uma abordagem fenomenológica em que foi preservada a estrutura da lei de endurecimento plástica, em conjunto com um coeficiente adicional para controlar a velocidade dos processos de pressão-solução. Uma vez que a compactação mecânica e a compactação químico-mecânica são processos interdependentes que ocorrem na natureza, o comportamento plástico e viscoplástico do material foram acoplados no modelo constitutivo por meio do Jacobiano irreversível da transformação nas respectivas leis de encruamento. Desta forma, o modelo constitutivo poro-elasto-visco-plástico é capaz de representar as diferentes fases do processo de deformação que ocorre ao longo da diagênese.

Devido ao papel fundamental da temperatura na evolução de bacias sedimentares, os efeitos térmicos foram incorporados no modelo constitutivo do material poroso. Com o propósito de uma abordagem inicial para este tema, optou-se por realizar o acoplamento de forma parcial. De um lado, a temperatura atua diretamente no comportamento poromecânico do material a partir de termos adicionados nas suas equações de estado. Por outro lado, as deformações e variações de pressão são desconsideradas na equação de balanço de entropia. Desta forma, a evolução das temperaturas na bacia é obtida a partir da solução de um problema de condução térmica, onde os efeitos poromecânicos são considerados através das modificações da geometria e das propriedades térmicas do material ao longo do tempo.

Um aspecto de grande importância do modelo diz respeito à consideração dos efeitos das mudanças na microestrutura e na temperatura do material sobre suas propriedades termoporemecânicas. A evolução destes parâmetros em função da porosidade é determinada por meio de leis de homogeneização obtidas de abordagens variacionais e estimativas micromecânicas, enquanto que os efeitos térmicos são determinados em função de modelos desenvolvidos a partir de observações de experimentos realizados em laboratório. A solução do problema de condução térmica e o acoplamento termoporemecânico incorporado no modelo constitutivo do material poroso permite representar de forma mais adequada os diferentes processos que ocorrem ao longo da história de formação e deformação de bacias sedimentares.

Para a realização das simulações numéricas foi desenvolvida uma ferramenta computacional via método dos elementos finitos com uma interface de processamento em paralelo com memória compartilhada. A ferramenta é dividida em três módulos. O primeiro trata da simulação dos processos de deposição/erosão sedimentar, onde um algoritmo baseado na técnica de ativação/desativação de elementos é utilizado para que o sistema material aberto real seja representado por meio de um sistema fechado fictício capaz de reproduzir apropriadamente os fenômenos associados. O segundo é o módulo poromecânico, onde um elemento hexaédrico híbrido de 20 nós é utilizado para a discretização espacial, com funções de interpolação quadráticas aplicadas sobre os 20 nós do elemento para representar os deslocamentos da malha, e funções de interpolação lineares aplicadas nos 8 nós dos vértices do hexaedro para representar as variações de poro-pressão. O terceiro módulo refere-se ao problema de condução térmica, onde hexaedros de 8 nós com funções de interpolação lineares são utilizados para obter as variações de temperatura nodais da malha. Os módulos térmico e poromecânico foram validados separadamente a partir de soluções analíticas inseridas no contexto desta tese.

A fim de investigar o comportamento do modelo constitutivo desenvolvido e sua capacidade de representar os processos de compactação gravitacional de uma bacia sedimentar, diferentes análises numéricas foram realizadas. O modelo computacional é formado por uma coluna de elementos finitos em condições oedométricas, o que corresponde a um problema de evolução unidimensional associado a uma bacia com extensões laterais infinitas. Este domínio geométrico representa um ambiente oceânico, onde ao longo de dezenas de milhões de anos ocorre um significativo evento de deposição sedimentar. Um fluxo térmico ascendente é aplicado na base do modelo para representar o calor produzido e conduzido pelas camadas que se encontram abaixo do assoalho oceânico. Conforme o processo de compactação gravitacional avança, são reproduzidas as diferentes etapas observadas ao longo da diagênese.

Para diferenciar os efeitos das diferentes contribuições realizadas ao longo deste trabalho, optou-se por realizar as simulações numéricas em três etapas. Na primeira etapa foi simulado o processo de deformação puramente mecânica da bacia em condições isotérmicas, o que corresponde ao modelo constitutivo adotado como ponto de partida desta tese. Na segunda etapa foram incorporadas as deformações de natureza químico-mecânica na análise, onde se observou o fenômeno da relaxação das tensões efetivas e as transições que ocorreram entre os diferentes regimes de deformação do material: elástico, elasto-plástico, elasto-plástico-viscoplástico e elasto-viscoplástico. Na terceira etapa a análise numérica foi realizada em condições não-isotérmicas, onde foram constatados os efeitos da temperatura sobre a viscosidade do fluido e propriedades físico-químicas dos minerais, e ficou clara a importância do acoplamento termoporomecânico no comportamento do material sedimentar.

Com o objetivo de demonstrar a capacidade da ferramenta computacional desenvolvida em simular problemas de natureza tridimensional, um problema de compactação gravitacional foi proposto para uma história de deposição sedimentar heterogênea ao longo do plano horizontal da bacia, que resultou em camadas estratigráficas com espessuras variáveis. A partir dos resultados obtidos, concluiu-se que a ferramenta numérica é capaz de simular problemas tridimensionais complexos de deformação mecânica e químico-mecânica em condições não-isotérmicas associados à história de uma bacia sedimentar. Estes problemas podem contar com diversas características como camadas estratigráficas heterogêneas, diferentes propriedades termoporomecânicas iniciais para os materiais depositados, e variações no nível do mar, temperatura do oceano e fluxo térmico ao longo do tempo.

Alguns pontos referentes ao modelo constitutivo utilizado para representar o material sedimentar merecem ser brevemente comentados. Primeiro, o acoplamento hidro-mecânico total se faz necessário na modelagem de materiais porosos em situações onde a pressão do fluido tem um papel fundamental sobre o seu comportamento mecânico, assim como a deformação do esqueleto tem efeito direto sobre o desenvolvimento das poro-pressões, o que é exatamente o caso deste trabalho. Embora a temperatura tenha efeito importante sobre o comportamento do material, diversos autores desconsideram os efeitos da deformação do esqueleto e variação de poro-pressão na equação do balanço de entropia, o que resulta em um acoplamento parcial entre a temperatura e o modelo poromecânico. Este foi o caminho adotado como uma primeira abordagem para a modelagem termoporomecânica de bacias sedimentares, já que o custo computacional associado a um acoplamento total seria muito maior. No entanto, investigações complementares devem ser feitas no contexto da termoporomecânica finita para que se tenha mais clareza sobre a eficiência do acoplamento parcial em detrimento ao acoplamento total.

Segundo, fica evidente a necessidade de se trabalhar no âmbito das grandes deformações, já que nas análises apresentadas a deformação da bacia chegou a 60%. Neste contexto, a premissa de que a componente elástica da deformação é de caráter infinitesimal parece bem razoável. Justificam-se também os termos relativos à evolução das propriedades termoporomecânicas do material nas equações constitutivas, pois o material depositado com elevada porosidade é submetido a alterações irreversíveis da sua microestrutura, o que modifica suas propriedades termoporomecânicas e afeta o comportamento global da bacia.

Terceiro, desconsiderar a anisotropia induzida pelo carregamento na evolução das propriedades do material é algo questionável devido ao alto grau de deformação vertical que ocorre durante a compactação gravitacional da bacia. Isto não corresponde a uma premissa sobre o comportamento do material, mas sim a uma simplificação adotada no modelo constitutivo. No entanto, considerar sua anisotropia exigiria desenvolver novos modelos micromecânicos para a evolução de seus parâmetros, como a lei de encruamento, permeabilidade, condutividade térmica, e também as leis de evolução dos módulos elásticos drenados do esqueleto.

Quarto, optou-se pelo modelo plástico de Cam-Clay modificado devido a sua boa representação do comportamento de diversos tipos de solos, não permitindo tensões efetivas médias de tração no material, nem tensões confinantes infinitas. O modelo também permite simular o comportamento compressivo/dilatante/não-drenado de acordo com a relação entre a tensão

desviadora e a tensão efetiva média em que o material se encontra. Embora tenha sido originalmente desenvolvido para representar o comportamento de argilas saturadas do rio Cam, este modelo tem sido amplamente utilizado para outros tipos de solos, apresentando bons resultados quando comparado a ensaios experimentais. No caso da viscoplasticidade, parece razoável utilizar o mesmo modelo adotado para a plásticidade, para que se tenham superfícies de escoamento plástica e viscoplástica com a mesma forma, o que possibilita modelar mais facilmente as transições entre os diferentes regimes de deformação.

Quinto, a lei de encruamento logarítmica utilizada é interessante, pois previne o desenvolvimento numérico de porosidade negativa no material, o que já foi constatado com o modelo de endurecimento exponencial em trabalhos semelhantes desenvolvidos por outros autores. Optou-se por adotar uma lei semelhante para o endurecimento viscoplástico, com um coeficiente adicional para controlar a velocidade das deformações. No entanto, enquanto a primeira foi desenvolvida a partir de uma análise micromecânica, a segunda foi adotada apenas por similitude. Uma abordagem baseada na micromecânica seria adequada no contexto da viscoplasticidade para associar de forma mais adequada a evolução de suas propriedades microscópicas ao seu comportamento macroscópico.

Sexto, vale salientar o fato de as leis de encruamento plástica e viscoplástica estarem definidas em função do Jacobiano irreversível da transformação, o que faz com que os diferentes fenômenos ocorram de forma acoplada. No entanto, entende-se que os processos de compactação mecânica e químico-mecânica podem ocorrer na natureza de forma interdependente, afetando diretamente um ao outro. Este acoplamento entre o comportamento plástico e viscoplástico do material é considerado um ponto chave do modelo, pois permite modelar mais adequadamente a sequência dos fenômenos observados ao longo da diagênese.

Sétimo, alguns questionamentos podem ser feitos a respeito da abordagem adotada para o efeito da temperatura nas equações de estado do material poroso no âmbito das grandes deformações, como o limite de validade do modelo quando o material atinge porosidade muito pequena associada a um módulo de compressão muito elevado dos minerais. No entanto, ainda existe muito pouca informação na literatura científica a respeito deste assunto, e o presente trabalho pode servir como um ponto de partida para desenvolvimentos futuros no contexto da termoporomecânica finita. Estudos micromecânicos complementares seriam interessantes para melhor compreender a interação que ocorre entre os diversos fenômenos associados.

Alguns comentários a respeito da ferramenta computacional também se fazem necessários. Primeiro, a escolha de utilizar elementos hexaédricos para a discretização espacial e interpolação das incógnitas do problema é atribuída a sua estabilidade e eficiência computacional quando comparado a elementos tetraédricos. Além disto, as geometrias e as malhas dos problemas propostos nesta tese eram muito simples. Simulações numéricas que envolvam geometrias mais complexas podem levar a necessidade de incorporar elementos tetraédricos devido à sua flexibilidade na geração das malhas. Em relação ao programa desenvolvido, esta tarefa pode ser facilmente realizada, exigindo poucas mudanças na sua estrutura de dados.

Segundo, foi implementada a interface de processamento em paralelo com memória compartilhada *OpenMP*, o que permitiu acelerar o tempo de solução dos problemas. Porém, as simulações numéricas tridimensionais de bacias sedimentares realizadas neste trabalho, com não-linearidades físicas e geométricas em uma escala de tempo geológica, apresentam um custo computacional muito elevado. Neste sentido, seria interessante adotar outras técnicas mais avançadas de processamento de dados como a utilização de placas gráficas (*GPU*) e memória distribuída (*MPI*) para melhorar a velocidade de processamento do código computacional.

Terceiro, dois métodos de solução do sistema de equações são utilizados, um direto e um iterativo, aplicados em conjunto com uma estrutura de dados no formato *CSR* que reduz o custo de memória computacional. Para o método direto utiliza-se o pacote *Intel MKL*, que contém subrotinas eficientes e compatíveis com a interface de multiprocessamento adotada. O método iterativo adotado corresponde aos Gradientes Conjugados Pré-condicionado (*PCG*). Embora existam diversas pesquisas na área do cálculo numérico associadas ao desenvolvimento de pré-condicionadores mais eficientes, optou-se por utilizar o pré-condicionador diagonal devido a sua simplicidade e facilidade de implementação. No entanto, este é um campo que merece atenção devido a sua capacidade de otimização do tempo de processamento.

Quarto, foram adotados algoritmos explícitos para a integração das deformações plásticas e viscoplásticas neste trabalho. Esta decisão foi tomada a partir da realização de diversos testes de eficiência e precisão destes algoritmos em comparação com algoritmos implícitos. Além de confiáveis, os algoritmos adotados apresentaram maior eficiência computacional, pois reduziram significativamente o custo computacional.

Quinto, a técnica de ativação/desativação de elementos utilizada para simular o sistema material aberto e representar o processo de deposição/erosão sedimentar da bacia é eficaz e de

simples implementação. Porém, esta técnica leva a algumas dificuldades computacionais adicionais. Uma delas é que todos os elementos que serão depositados ao longo da história de formação da bacia já devem estar representados na malha desde o início da simulação, o que leva a um custo computacional adicional para processar os elementos que ainda não foram ativados, pois fazem parte da matriz de rigidez e das incógnitas do problema. Outra dificuldade deve-se ao fato que, para que os elementos desativados não tenham impacto sobre a evolução do problema, deve-se atribuir a eles valores muito elevados para a permeabilidade e condutividade térmica, o que acaba levando ao mal condicionamento da matriz de rigidez, interferindo negativamente nos métodos de solução do sistema de equações. Uma alternativa para contornar estas dificuldades seria adotar algoritmos que acrescentem ou removam automaticamente os elementos da malha conforme o material é depositado ou erodido. Porém, a dificuldade técnica de algoritmos desta natureza é maior, já que exigem técnicas de realocação dinâmica de memória e de remapeamento automático da estrutura de dados cada vez que um elemento finito é adicionado ou excluído do problema.

Sexto, as simulações numéricas realizadas ficaram restritas aos processos de formação e compactação gravitacional da bacia, já que ainda não foram implementadas as ferramentas necessárias para lidar com as descontinuidades associadas às fraturas que se desenvolvem em função da tectônica de placas. Todavia, este é um assunto de extrema importância já que a história das bacias costuma estar diretamente ligada às deformações induzidas pelas sequências tectônicas. Existem métodos amplamente difundidos na literatura para lidar com as descontinuidades desta natureza e que podem ser incorporados no programa computacional, como o Embedded Finite Element Method (*EFEM*) e o Extended Finite Element Method (*XFEM*).

As simulações numéricas do problema de compactação gravitacional da bacia foram feitas em um cenário puramente acadêmico, onde diversos aspectos da modelagem foram simplificados, como o nível do mar, a temperatura do oceano e o fluxo térmico na base da bacia, mantidos fixos ao longo da análise, assim como a taxa de deposição sedimentar constante e o fato de considerar que todo material depositado continha as mesmas propriedades iniciais. Estas decisões foram tomadas para isolar os efeitos que a aplicação de condições de contorno variáveis teria sobre o material, de forma que se pudesse investigar e compreender mais claramente todo o processo de evolução do modelo constitutivo desenvolvido. O mesmo pode ser dito em relação ao tempo total da análise, que embora seja exagerado, permitiu levar o material sedimentar à condição limite de quase fechamento total dos poros.

Como a proposta desta tese foi de representar apenas o comportamento qualitativo do material e da bacia sedimentar como um todo, não se preocupou em caracterizar o material depositado de forma mais específica. Portanto, os valores adotados para as propriedades termoporomecânicas iniciais foram obtidos a partir de informações encontradas em pesquisas publicadas por diversos autores a respeito dos diferentes fenômenos estudados, procurando manter a coerência entre os valores adotados e as respectivas curvas de evolução dos parâmetros envolvidos em função da variação da microestrutura e da temperatura do material. Contudo, as leis de evolução micromecânicas e fenomenológicas do modelo constitutivo estão apresentadas de maneira generalizada. No caso de se desejar representar o comportamento específico de um determinado material, seria necessária a incorporação de coeficientes adicionais nestas leis, e também a realização de uma extensa calibração do modelo junto a ensaios experimentais.

Embora a análise numérica realizada neste trabalho corresponda a um cenário geológico simplificado, os resultados obtidos estão de acordo com as principais características dos processos de formação e deformação de uma bacia sedimentar. Entre os diferentes aspectos observados, pode-se destacar que os níveis de deformação obtidos, assim como as tensões efetivas, as pressões e as temperaturas que se desenvolveram na bacia são coerentes com as evidências geológicas disponíveis. Os perfis de porosidade e os gradientes geotérmicos também estão de acordo com diversas investigações geológicas e simulações numéricas realizadas por outros autores. Foi possível identificar de forma clara toda a sequência do processo de compactação, as regiões em que prevaleceram as deformações puramente mecânicas, as deformações químico-mecânicas e também as zonas de transição onde os fenômenos atuaram simultaneamente. As espessuras e profundidades correspondentes a estes fenômenos também ficaram de acordo com as informações fornecidas na literatura.

Fica claro que os desenvolvimentos teóricos e computacionais realizados nesta tese ainda precisam ser validados por meio de análises quantitativas com dados reais. No entanto, o modelo constitutivo e a ferramenta numérica demonstram capacidade suficiente para simular o comportamento do material sedimentar e os diferentes processos termoporomecânicos associados à história de bacias sedimentares. Ferramentas desta natureza são de grande importância no contexto da engenharia do petróleo, onde o desenvolvimento tecnológico é de extrema importância para que os processos de prospecção e exploração sejam feitos de forma cada vez mais precisa e segura, evitando desperdícios financeiros.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Ainda há uma diversidade de temas a serem explorados no que diz respeito à modelagem de bacias sedimentares. Em relação ao modelo constitutivo, alguns aspectos relevantes já foram comentados ao longo do trabalho, como a necessidade de investigar melhor as componentes do acoplamento térmico e também o desenvolvimento de leis micromecânicas que possibilitem realizar a descrição do material considerando a anisotropia gerada pelas grandes deformações. Outro aspecto de grande importância é o desenvolvimento de uma abordagem multi-fluidos para o material poroso, no intuito de realizar simulações numéricas associadas ao transporte de água, gás e óleo nas bacias. Seria interessante também a calibração do modelo para caracterizar o comportamento de materiais específicos a fim de simular problemas reais.

No que diz respeito ao aprimoramento da ferramenta computacional, é imprescindível o avanço no campo da computação de alto desempenho para que se torne viável a realização de simulações com maior grau de complexidade. Para isso é necessário investir em formas mais eficientes de processamento, como as interfaces de processamento em memória distribuída (*MPI*) e também em placas gráficas (*GPU*). É fundamental a incorporação de ferramentas capazes de lidar com as descontinuidades associadas a meios falhados e fraturados como o *EFEM* e o *XFEM* para que se possa realizar simulações que envolvam um contexto tectônico, já que estes fenômenos estão associados as bacias sedimentares encontradas pelo mundo.

REFERÊNCIAS

- ABDULAGATOVA, Z.; ABDULAGATOV, I.M.; EMIROV, V.N. Effect of temperature and pressure on the thermal conductivity of sandstone. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* 2009; 46:1055–1071.
- ADACHI, T.; OKA, F. Constitutive equations for normally consolidated clay based on elasto-viscoplasticity. *Soils and Foundations* 1982; 22(4):57–70.
- AHRENS, T.J. Mineral physics & crystallography: a handbook of physical constants. American Geophysical Union: Washington, 1995.
- AKAKI, T.; KIMOTO, S.; OKA, F. Chemo-thermo-mechanically coupled seismic analysis of methane hydrate-bearing sediments during a predicted Nankai Trough Earthquake. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. Acesso em: 22 abril 2016. DOI: 10.1002/nag.2527.
- ALLEN, P.A.; ALLEN, J.R. Basin analysis: principles and applications. 2nd ed. Blackwell Science Ltd: Oxford, 2005.
- AMIR, L.; MARTINEZ, L.; DISNAR, J.R.; VIGNERESSE, J.-L.; MICHELS, R.; GUILLO-CHEAU, F.; ROBIN, C. Effect of the thermal gradient variation through geological time on basin modeling; a case study: the Paris basin. *Tectonophysics* 2005; 400:227–240.
- ANGEVINE, C.L.; TURCOTTE, D.L. Porosity reduction by pressure solution: a theoretical model for quartz arenites. *Geological Society of America Bulletin* 1983; 94:1129–1134.
- ANZALONE, A.; BOLES, J.; GREENE, G.; YOUNG, K.; ISRAELACHVILI, J.; ALCANTAR, N. Confined fluids and their role in pressure solution. *Chemical Geology* 2006; 230:220–231.
- BARTHÉLÉMY, J.-F.; DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S. Micromechanical approach to the modelling of compaction at large strains. *Computers and Geotechnics* 2003; 30:321–338.
- BATHE, K.J. Finite element procedures. Prentice-Hall: Upper Saddle River, 1996.
- BERGAMASCHI, L.; FERRONATO, M.; GAMBOLATI, G. Novel preconditioners for the iterative solution to FE-discretized coupled consolidation equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2007; 196:2647–2656.
- BERGAMASCHI, L.; MARTINEZ, A. RMCP: Relaxed Mixed Constraint Preconditioners for saddle point linear systems arising in geomechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2012; 221–222:54–62.
- BERNAUD, D.; BUHAN, P. de; MAGHOUS, S. Numerical simulation of the convergence of a bolt-supported tunnel through a homogenization method. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 1995; 19:267–288.

- BERNAUD, D.; DEUDÉ, V.; DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S.; SCHMITT, D.P. Evolution of elastic properties in finite poroplasticity and finite element analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2002; 26:845–871.
- BERNAUD, D.; DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S. A constitutive and numerical model for mechanical compaction in sedimentary basins. *Computers and Geotechnics* 2006; 33:316–329.
- BETHKE, C.M. A numerical model of compaction-driven groundwater flow and heat transfer and its application to the paleohydrology of intracratonic sedimentary basins. *Journal of Geophysical Research* 1985; 90(8):6817–6828.
- BJORLYKKE, K. Petroleum geoscience: from sedimentary environments to rock physics. Springer: Berlin, 2010.
- BJORLYKKE, K. Relationships between depositional environments, burial history and rock properties. Some principal aspects of diagenetic process in sedimentary basins. *Sedimentary Geology* 2014; 301:1–14.
- BOER, R.B. de. On the thermodynamics of pressure solution – interaction between chemical and mechanical forces. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 1977; 41:249–256.
- BOER, R.B. de; NAGTEGAAL, P.J.C.; DUYVIS, E.M. Pressure solution experiments on quartz sand. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 1977; 41:257–264.
- BOOKER, J.R.; SAVVIDOU, C. Consolidation around a point heat source. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 1985; 9:173–184.
- BOOKER, J.R.; SMALL, J.C. An investigation of the stability of numerical solutions of Biot's equations of consolidation. *International Journal of Solids and Structures* 1975; 11:907–917.
- BORJA, R.I. Finite element formulation for transient pore pressure dissipation: a variational approach. *International Journal of Solids and Structures* 1986; 22(11):1201–1211.
- BORJA, R.I.; LEE, S.R. Cam-clay plasticity, part 1: implicit integration of elasto-plastic constitutive relations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1990; 78:49–72.
- BOURGEOIS, E.; DORMIEUX, L. Prise en compte des non-linéarités géométriques dans la modélisation de la compaction des sédiments. *Oil & Gas Science and Technology - Revue de l'Institut Français du Pétrole* 1997; 52(1):23–34.
- BOURGEOIS, E.; BUHAN, P. de; DORMIEUX, L. Formulation d'une loi élastoplastique pour un milieu poreux saturé en transformation finie. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II: Mécanique, physique, chimie, astronomie* 1995; 321:175–182.
- BROTÓNS, V.; TOMÁS, R.; IVORRA, S.; ALARCÓN, J.C. Temperature influence on the physical and mechanical properties of a porous rock: San Julian's calcarenite. *Engineering Geology* 2013; 167:117–127.

- BRÜCH, A.; MAGHOUS, S.; RIBEIRO, F.L.B.; DORMIEUX, L. A constitutive model for mechanical and chemo-mechanical compaction in sedimentary basins and finite element analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2016; DOI: 10.1002/nag.2530.
- BUITER, S. J.H.; PFIFFNER, O.A.; BEAUMONT, C. Inversion of extensional sedimentary basins: a numerical evaluation of the localisation of shortening. *Earth and Planetary Science Letters* 2009; 288:492–504.
- BUSBY, C.J.; INGERSOLL, R.V. Tectonics of sedimentary basins. Blackwell Science: Malden, 1995.
- CARDOSO, R.A.; HAMZA, V.M. Heat flow in the Campos sedimentary basin and thermal history of the continental margin of southeast Brazil. *ISRN Geophysics* 2014.
- CARMAN, P.C. Fluid flow through granular beds. *Transactions, Institution of Chemical Engineers, London* 1937; 15:150–166.
- CARSON, B. Tectonically induced deformation of deep-sea sediments off Washington and Northern Oregon: mechanical consolidation. *Marine Geology* 1977; 24:289–307.
- CHAPMAN, B.; JOST, G.; PAS, R. van der. Using OpenMP: portable shared memory parallel programming. The MIT Press: Cambridge, 2008.
- CHAPUIS, R.P.; AUBERTIN, M. Predicting the coefficient of permeability of soils using the Kozeny-Carman equation. École Polytechnique de Montréal, 2003.
- CHARLEZ, P.A. Rock Mechanics. Vol. 2: petroleum applications. Editions Technip, 1997.
- CHEN, X.; PHOON, K.K.; TOH, K.C. Partitioned versus global Krylov subspace iterative methods for FE solution of 3-D Biot's problem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2007; 196:2737–2750.
- CLOETINGH, S.; SPADINI, G.; WEES, J.D. van; BEEKMAN, F. Thermo-mechanical modelling of Black Sea Basin (de)formation. *Sedimentary Geology* 2003; 156:169–184.
- CLOETINGH, S.; WEES, J. D. van; ZIEGLER, P.A.; LENKEY, L.; BEEKMAN, F.; TE-SAURO, M.; FORSTER, A.; NORDEN, B.; KABAN, M.; HARDEBOL, N.; BONTE, D.; GENTER, A.; GUILLOU-FROTTIER, L.; VOORDE, M. ter; SOKOUTIS, D.; WIL-LINGSHOFER, E.; CORNU, T.; WORUM, G. Lithosphere tectonics and thermo-mechanical properties: an integrated modelling approach for Enhanced Geothermal Systems exploration in Europe. *Earth-Science Reviews* 2010; 102:159–206.
- CLOETINGH, S.A.P.L.; WORTEL, M.J.R.; VLAAR, N.J. Passive margin evolution, initiation of subduction and the Wilson Cycle. *Tectonophysics* 1984; 109:147–163.
- CONDIE, K.C. Plate Tectonics and Crustal Evolution. 4th ed. Butterworth-Heinemann: Oxford, 1997.
- COUSSY, O. Poromechanics. John Wiley & Sons Ltd: Chichester, 2004.

- CULL, J.P.; CONLEY, D. Geothermal gradients and heat flow in Australian sedimentary basins. *BMR Journal of Australian Geology & Geophysics* 1983; 8:329–337.
- DEMETS, C.; GORDON, R.G.; STEIN, S.; ARGUS, D.F. Current plate motions. *Geophysical Research Letters* 1990; 14:911–914.
- DEUDÉ, V.; DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S.; BARTHÉLÉMY, J.-F.; BERNAUD, D. Compaction process in sedimentary basins: the role of stiffness increase and hardening induced by large plastic strains. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2004; 28:1279–1303.
- DHATT, G.; TOUZOT, G. Une présentation de la méthode des éléments finis. 2ème édition. Maloine S.A. Éditeur: Paris, 1984.
- DICKINSON, W.R. Plate tectonics and sedimentation. *Society of Economic Paleontologists and Mineralogists Special Publication* 1974; 22:1–27.
- DIVINS, D.L. Total sediment thickness of the world's oceans & marginal seas. NOAA National Geophysical Data Center, 2003.
- DORMIEUX, L.; KONDO, D.; ULM, F.-J. Microporomechanics. John Wiley & Sons Ltd: Chichester, 2006.
- DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S. Évolution des propriétés élastiques en poroplasticité finie. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II: Mécanique, physique, chimie, astronomie* 2000; 328:593–600.
- DORMIEUX, L.; MAGHOUS, S. Poroelasticity and poroplasticity at large strains. *Oil & Gas Science and Technology* 1999, 54:773–784.
- DURETZ, T.; AGARD, P.; YAMATO, P.; DUCASSOU, C.; BUROV, E.B.; GERYA, T.V. Thermo-mechanical modeling of the obduction process based on the Oman Ophiolite case. *Gondwana Research* 2016; 32:1-10.
- FAS. Federation of American Scientists. Disponível em: <http://fas.org/irp/imint/docs/rst/Sect19/Sect19_2a.html>. Acesso em: 05 julho 2016.
- FELIPPA, C.A.; PARK, K.C. Staggered transient analysis procedures for coupled mechanical systems: formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1980; 24:61–111.
- FELIPPA, C.A.; PARK, K.C.; FARHAT, C. Partitioned analysis of coupled mechanical systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2001; 190:3247–3270.
- FERRERO, C.; GALLAGHER, K. Stochastic thermal history modelling. 1. Constraining heat flow histories and their uncertainty. *Marine and Petroleum Geology* 2002; 19:633–648.
- FERRONATO, M. Preconditioning for sparse linear systems at the dawn of the 21st century: history, current developments, and future perspectives. International Scholarly Research Network, 2012.

FERRONATO, M.; GAMBOLATI, G.; TEATINI, P. Ill-conditioning of finite element poroelasticity equations. *International Journal of Solids and Structures* 2001; 38:5995–6014.

FERRONATO, M.; JANNA, C.; PINI, G. Parallel solution to ill-conditioned FE geomechanical problems. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2012; 36:422–437.

FUCHS, S.; SCHÜTZ, F.; FÖRSTER, H.-J.; FÖRSTER, A. Evaluation of common mixing models for calculating bulk thermal conductivity of sedimentary rocks: correction charts and new conversion equations. *Geothermics* 2013; 47:40–52.

GAHERTY, J.B.; KATO, M.; JORDAN, T.H. Seismological structure of the upper mantle: a regional comparison of seismic layering. *Physics of Earth and Planetary Interiors* 1999; 110:21–41.

GALLAGHER, K.; RAMSDALE, M.; LONERGAN, L.; MORROW, D. The role of thermal conductivity measurements in modelling thermal histories in sedimentary basins. *Marine and Petroleum Geology* 1997; 14(2):201–214.

GEOWIKI. Understanding Plate Tectonics. Disponível em:
<http://geowiki.ucdavis.edu/Core/Plate_Tectonics/Understanding_Plate_Tectonics>. Acesso em: 05 julho 2016.

GHOUSSOUB J., LEROY, Y.M. Solid-fluid phase transformation within grain boundaries during compaction by pressure solution. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 2001; 49:2385–2430.

GIBSON, R.E. The progress of consolidation in a clay layer increasing with time. *Géotechnique* 1958; 8:171–182.

GILES, M.R. Diagenesis: a quantitative perspective. Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, 1997.

GONZÁLEZ-GÓMEZ, W.S.; QUINTANA, P.; MAY-PAT, A.; AVILÉS, F.; MAY-CRESPO, J.; ALVARADO-GIL, J.J. Thermal effects on the physical properties of limestones from the Yucatan Peninsula. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* 2015; 75:182–189.

GUÉGUEN, Y.; DORMIEUX, L.; BOUTÉCA, M. Chapter 1 Fundamentals of poromechanics. *International Geophysics* 2003; 89:1–54.

GUNDERSEN, E.; RENARD, F.; DYSTHE, D.K.; BJORLYKKE, K.; JAMTVEIT, B. Coupling between pressure solution creep and diffusive mass transport in porous rocks. *Journal of Geophysical Research* 2002; 107:1–19.

GUNZBURGER, Y. Stress state interpretation in light of pressure-solution creep: numerical modelling of limestone in the Eastern Paris Basin, France. *Tectonophysics* 2010; 483:377–389.

GUTIERREZ, M.; WANGEN, M. Modeling of compaction and overpressuring in sedimentary basins. *Marine and Petroleum Geology* 2005; 22:351–363.

- HAENEL, R.; RYBACH, L.; STEGENA, L. Handbook of terrestrial heat-flow density determination. Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, 1988.
- HAGER, G.; WELLEIN, G. Introduction to high performance computing for scientists and engineers. CRC Press: Boca Raton, 2011.
- HALLETT, J. The temperature dependence of the viscosity of supercooled water. *Proceedings of the Physical Society* 1963; 82:1046–1050.
- HAMILTON, E.L. Thickness and consolidation of deep-sea sediments. *Bulletin of the Geological Society of America* 1959; 70:1399–1424.
- HANAFY, E.A.; EMERY, J.J. Advancing face simulation of tunnel excavations and lining placement. *13th Canadian Rock Mechanics Symposium: Underground Rock Engineering* 1980; 119–125.
- HASHIN, Z. Analysis of composite materials – a survey. *Journal of Applied Mechanics* 1983; 50:481–505.
- HASHIN, Z.; SHTRIKMAN, S. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *Journal of Applied Physics* 1962; 33(10):3125–3131.
- HASHIN, Z.; SHTRIKMAN, S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 1963; 11:127–140.
- HEDBERG, H.D. Gravitational compaction of clays and shales. *American Journal of Science* 1936; 31:241–287.
- HELLMANN, R.; RENDERS, P.J.N.; GRATIER, J.-P.; GUIGUET, R. Experimental pressure solution compaction of chalk in aqueous solutions Part 1. Deformation behavior and chemistry. *The Geochemical Society Special Publication* 2002; 7:129–152.
- HICKMAN, S.H.; EVANS, B. Experimental pressure solution in halite: the effect of grain/interphase boundary structure. *Journal of the Geological Society* 1991; 148:549–560.
- HILL, R. The mathematical theory of plasticity. Clarendon Press: Oxford, 1950.
- HOLMAN, J.P. Heat transfer. 8th ed. McGraw-Hill: New York, 1997.
- HU, D.W.; ZHOU, H.; ZHANG, F.; SHAO, J.F. Evolution of poroelastic properties and permeability in damaged sandstone. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* 2010; 47:962–973.
- HUBBERT, M.K.; RUBEY, W.W. Role of fluid pressure in mechanics of overthrust faulting. I. Mechanics of fluid-filled porous solids and its application to overthrust faulting. *Geological Society of America Bulletin* 1959; 70(2):115–166.
- IAPWS. Revised release on the IAPS formulation 1985 for the thermal conductivity of ordinary water substance. Releases of the International Association for the Properties of Water and Steam, IAPWS, 1998.

IAPWS. Revised release on the IAPS formulation 1985 for the viscosity of ordinary water substance. Releases of the International Association for the Properties of Water and Steam, IAPWS, 2003.

INGALL, E.D.; CAPPELLEN, P.V. Relation between sedimentation rate and burial of organic phosphorus and organic carbon in marine sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 1990; 54:373–386.

INTEL. Intel Math Kernel Library Developer Reference. Disponível em: <<https://software.intel.com/en-us/articles/mkl-reference-manual>>. Acesso em: 08 março 2016.

JACKSON, J. Faulting, flow, and strength of the continental lithosphere. *International Geological Review* 2002; 44:39–61.

JAROSINSKI M.; BEEKMAN F.; MATENCO L.; CLOETINGH S. Mechanics of basin inversion: finite element modeling of the Pannonian Basin system. *Tectonophysics* 2011; 502:121–145.

JESSOP, A.M.; MAJOROWICZ, J.A. Fluid flow and heat transfer in sedimentary basins. *Geofluids: Origin, Migration and Evolution of Fluids in Sedimentary Basins, Geological Society Special Publication* 1994; 78:43-54.

KANAMORI, H.; PRESS, F. How thick is the lithosphere? *Nature* 1970; 226:330–331.

KARATO, S.-I. Deformation of Earth Materials: An Introduction to the Rheology of Solid Earth. Cambridge University Press: New York, 2008.

KARDANI, O.; LYAMIN, A.; KRABBENHOFT, K. Application of a GPU-accelerated hybrid preconditioned conjugate gradient approach for large 3D problems in computational geomechanics. *Computers and Mathematics with Applications* 2015; 69:1114–1131.

KESTIN, J.; SOKOLOV, M.; WAKEHAM, W.A. Viscosity of liquid water in the range -8°C to 150°C. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 1978; 7(3):941–948.

KIM, J.; TCHELEPI, H.A.; JUANES, R. Stability and convergence of sequential methods for coupled flow and geomechanics: drained and undrained splits. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2011; 200:2094–2116.

KOMATINA, M.M. Medical Geology: effects of geological environments on human health. Elsevier: Amsterdam, 2004.

KOZENY, J. Ueber kapillare Leitung des Wassers im Boden. *Sitzungsber Akad. Wiss. Wien* 1927; 136(2a): 271–306.

KRAUSE, G. Finite element schemes for porous elastic media. *Journal of the Engineering Mechanics Division – Proceedings of the American Society of Civil Engineers* 1978; 104(3):605–620.

KUTASOV, I.M. Developments in petroleum science V.48: applied geothermics for petroleum engineers. Elsevier: Amsterdam, 1999.

LAMBE, T.W.; WHITMAN, R.V. Soil Mechanics. John Wiley & Sons Ltd: New York, 1969.

- LEE, E.H. Elastic-plastic deformation at finite strains. *Journal of Applied Mechanics* 1969; 36:1–6.
- LEE, Y.; DEMING, D. Evaluation of thermal conductivity temperature corrections applied in terrestrial heat flow studies. *Journal of Geophysical Research* 1998; 103(B2):2447–2454.
- LEEDER, M.R. Sedimentology and sedimentary basins: from turbulence to tectonics. Blackwell Science Ltd: Oxford, 1999.
- LEHNER, F.K. A model for intergranular pressure solution in open systems. *Tectonophysics* 1995; 245:153–170.
- LEHNER, F.K.; LEROY, Y.M. Sandstone compaction by intergranular pressure solution. *International Geophysics, Mechanics of Fluid-Saturated Rocks* 2003; 89:115–168.
- LEWIS, R.W.; NITHIARASU, P.; SEETHARAMU, K.N. Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow. John Wiley & Sons Ltd: Chichester, 2004.
- LEWIS, R.W.; SCHREFLER, B.A. The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media. 2nd ed. John Wiley & Sons Ltd: Chichester, 1998.
- MAGHOUS, S. A theoretical poro-elasto-visco-plastic model for mechanical and chemo-mechanical deformation in sedimentary basins. *Mechanics of Solids in Brazil* 2009; 331-349. Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering: Rio de Janeiro, 2009.
- MAGHOUS, S.; BRÜCH, A.; BERNAUD, D.; DORMIEUX, L.; BRAUN, A.L. Two-dimensional finite element analysis of gravitational and lateral-driven deformation in sedimentary basins. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2014; 38:725–746.
- MAGHOUS, S.; DORMIEUX, L.; BARTHÉLÉMY, J.-F. Micromechanical approach to the strength properties of frictional geomaterials. *European Journal of Mechanics A/Solids* 2009; 28:179–188.
- MANDEL, J. Plasticité classique et viscoplasticité. CISM Courses and Lectures V.97, Springer-Verlag, 1971.
- MAO, X.-B.; ZHANG, L.-Y.; LI, T.-Z.; LIU, H.-S. Properties of failure mode and thermal damage for limestone at high temperature. *Mining Science and Technology* 2009; 19(3):290–294.
- MATTILA, K.; PUURTINEN, T.; HYVÄLUOMA, J.; SURMAS, R.; MYLLYS, M.; TURPEINEN, T.; ROBERTSÉN, F.; WESTERHOLM, J.; TIMONEN, J. A prospect for computing in porous materials research: very large fluid flow simulations. *Journal of Computational Science* 2016; 12:62–76.
- MEER, S. de; SPIERS, C.J. Uniaxial compaction creep of wet gypsum aggregates. *Journal of Geophysical Research* 1997; 102:875–891.

- MEER, S. de; SPIERS, C.J. Influence of pore-fluid salinity on pressure solution creep in gypsum. *Tectonophysics* 1999a; 308:311–330.
- MEER, S. de; SPIERS, C.J. On mechanisms and kinetics of creep by intergranular pressure solution. In: *Growth, Dissolution and Pattern Formation in Geosystems*, 345–363. Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, 1999b.
- MEER, S. de; SPIERS, C.J.; PEACH, C.J. Kinetics of precipitation of gypsum and implications for pressure-solution creep. *Journal of the Geological Society, London* 2000; 157:269–281.
- MELLO, U.T.; RODRIGUES, J.R.P.; ROSSA, A.L. A control-volume finite-element method for three-dimensional multiphase basin modeling. *Marine and Petroleum Geology* 2009; 26:504–518.
- MIDTTOMME, K.; ROALDSET, E.; AAGAARD, P. Thermal conductivities of argillaceous sediments. *Geological Society Engineering Geology Special Publication, Modern Geophysics in Engineering Geology* 1997; 12:355–363.
- MINSTER, J.B.; JORDAN, T.H. Present-day plate motions. *Journal of Geophysical Research* 1978; 83:5331–5354.
- NGUYEN, Q.S. On the elastic plastic initial-boundary value problem and its numerical integration. *International Journal of Numerical Methods and Engineering* 1977; 11:817–832.
- NIEMEIJER, A.R.; SPIERS, C.J.; BOS, B. Compaction creep of quartz sand at 400–600°C: experimental evidence for dissolution-controlled pressure solution. *Earth and Planetary Science Letters* 2002; 195:261–275.
- PAIGE, C.C.; PARLETT, B.N.; VORST, H.A. van der. Approximate solutions and eigenvalue bounds from Krylov subspaces. *Numerical Linear Algebra with Applications* 1995; 2(2):115–133.
- PALUMBO, F.; MAIN, I.G.; ZITO, G. The thermal evolution of sedimentary basins and its effect on the maturation of hydrocarbons. *Geophysical Journal International* 1999; 139:248–260.
- PARSON, B.; SCLATER, J.G. An analysis of the variation of ocean floor bathymetry with heat flow and age. *Journal of Geophysical Research* 1977; 82:803–827.
- PELTIER, W.R. The thickness of the continental lithosphere. *Journal of Geophysical Research* 1984; 89:11303–11316.
- PERZYNA, P. Fundamental problems in viscoplasticity. *Advances in Applied Mechanics* 1966; 9:243–277.
- PHOON, K.K.; TOH, K.C.; CHAN, S.H.; LEE, F.H. An efficient diagonal preconditioner for finite element solution of Biot's consolidation equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2002; 55:377–400.
- PINTO, C.S. Curso básico de mecânica dos solos. 3a ed. Oficina de Textos: São Paulo, 2006.

POLLACK, H.N.; CHAPMAN, D.S. On the regional variation of heat flow, geotherms and lithospheric thickness. *Tectonophysics* 1977; 38:279–296.

QUIZLET. Plate Tectonics and Plate Boundaries. Disponível em: <<https://quizlet.com/55576866/plate-tectonics-and-plate-boundaries-flash-cards/>>. Acesso em: 05 julho 2016.

RAJ, R. Creep in polycrystalline aggregates by matter transport through a liquid phase. *Journal of Geophysical Research* 1982; 87:4731–4739.

RENARD, F., PARK, A., ORTOLEVA, P. GRATIER, J.-P. An integrated model for transitional pressure solution in sandstones. *Tectonophysics* 1999; 312:97–115.

RIBEIRO, F.L.B.; COUTINHO, A.L.G.A. Comparison between element, edge and compressed storage schemes for iterative solutions in finite element analyses. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2005; 63:569–588.

RIBEIRO, F.L.B.; FERREIRA, I.A. Parallel implementation of the finite element method using compressed data structures. *Computational Mechanics* 2007; 41:31–48.

ROBERTSON, E.C.; HEMINGWAY, B.S. Estimating heat capacity and heat content of rocks. U.S. Geological Survey, *Open-file Report* 95-662, 1995.

RUTTER, E.H. The kinetics of rock deformation by pressure solution. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 1976; 283:203–219.

RUTTER, E.H. Pressure solution in nature, theory and experiment. *Journal of the Geological Society* 1983; 140:725–740.

SAAD, Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2nd ed. Society for Industrial and Applied Mathematics: Philadelphia, 2003.

SANDHU, R.S.; WILSON, E.L. Finite-element analysis of seepage in elastic media. *Journal of the Engineering Mechanics Division - Proceedings of the American Society of Civil Engineers* 1969; 95(3):641–652.

SCHMIDT, V.; MCDONALD, D.A. The role of secondary porosity in the course of sandstone diagenesis. *Aspects of Diagenesis* 1979; 26:175–207.

SCHNEIDER, F.; HAY, S. Compaction model for quartzose sandstones application to the Garn Formation, Haltenbanken, Mid-Norwegian Continental Shelf. *Marine and Petroleum Geology* 2001; 18:833–848.

SCHNEIDER, F.; POTDEVIN, J.L.; WOLF, S.; FAILLE, I. Modèle de compaction élastoplastique et viscoplastique pour simulateur de bassins sédimentaires. *Revue de l'Institut Français du Pétrole* 1994; 49(2):141–148.

SCHNEIDER, F. POTDEVIN, J.L., WOLF, S. FAILLE, I. Mechanical and chemical compaction model for sedimentary basin simulators. *Tectonophysics* 1996; 263:307–317.

SCHREFLER, B.A. A partitioned solution procedure for geothermal reservoir analysis. *Communications in Applied Numerical Methods* 1985; 1:53–56.

- SCHREFLER, B.A.; SIMONI, L.; TURSKA, E. Standard staggered and staggered Newton schemes in thermo-hydro-mechanical problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1997; 144:93–109.
- SHIMIZU, I. Kinetics of pressure solution creep in quartz: theoretical considerations. *Tectonophysics* 1995; 245:121–134.
- SIMO, J.C.; HUGHES, T.J.R. *Computational Inelasticity*. Springer: New York, 1998.
- SLOAN, S.W.; ABBO, A.J. Biot consolidation analysis with automatic time stepping and error control part 1: theory and implementation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 1999; 23:467–492.
- SMITH, J.E. The dynamics of shale compaction and evolution of pore-fluid pressures. *Mathematical Geology* 1971; 3(3):239–263.
- SOMERTON, W.H. *Developments in petroleum science V.37: thermal properties and temperature-related behavior of rock/fluid systems*. Elsevier: Amsterdam, 1992.
- SOUTHHOUSEARTHQUAKERISK. Disponível em: <<https://southousearthquakerisk.wordpress.com/>>. Acesso em: 05 julho 2016.
- SOUZA-LIMA, W.; HANSI, G.P. Jr. Origem, evolução e classificação das bacias sedimentares. *Fundação Paleontológica Phoenix* 2003; 49.
- STEPHANSSON, O.; HUDSON, J.A.; JING, L. *Coupled thermo-hydro-mechanical-chemical processes in geo-systems: fundamentals, modelling, experiments and applications*. Elsevier: Oxford, 2004.
- STEPHENSON, R. Assumptions and observations in tectonic modelling of rift basins: some implications of thermo-isostasy, stress and rheology for intrabasinal structure. *Marine and Petroleum Geology* 1996; 13:437–445.
- STRANSKY, J.; VOREL, J.; ZEMAN, J.; SEJNOHA, M. Mori-Tanaka based estimates of effective thermal conductivity of various engineering materials. *Micromachines* 2011; 2(2):129–149.
- SYGALA, A.; BUKOWSKA, M.; JANOSZEK, T. High temperature versus geomechanical parameters of selected rocks – the present state of research. *Journal of Sustainable Mining* 2013; 12(4):45–51.
- TADA, R., SIEVER, R. Pressure solution during diagenesis. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 1989; 17:89–118.
- TAYLOR, D.W. *Fundamentals of soil mechanics*. John Wiley: New York, 1948.
- TES. Wilson Cycle - rock evolution. Disponível em: <<https://www.tes.com/lessons/LYqtK6wWI6rLwg/wilson-cycle-rock-evolution>>. Acesso em: 05 julho 2016.
- THINGLINK. Plate Boundaries. Disponível em: <<https://www.thinglink.com/scene/503621158831128577>>. Acesso em: 05 julho 2016.

- TURSKA, E.; WISNIEWSKI, K.; SCHREFLER, B.A. Error propagation of staggered solution procedures for transient problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1994; 114:177–188.
- ULAMEC, S.; BIELE, J.; FUNKE, O.; ENGELHARDT, M. Access to glacial and subglacial environments in the Solar System by melting probe technology. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology* 2007; 6:71–94.
- VASSEUR, G.; BRIGAUD, F.; DEMONGODIN, L. Thermal conductivity estimation in sedimentary basins. *Tectonophysics* 1995; 224:167–174.
- VORST, H.A. van der. Iterative krylov methods for large linear systems. Cambridge University Press: New York, 2003.
- VOSTEEN, H.-D.; SCHELLSCHMIDT, R. Influence of temperature on thermal conductivity, thermal capacity and thermal diffusivity for different types of rock. *Physics and Chemistry of the Earth* 2003; 28:499–509.
- WALCOTT, R.I. Flexural rigidity, thickness, and viscosity of the lithosphere. *Journal of Geophysical Research* 1970; 75:3941–3954.
- WANG, W.; KOSAKOWSKI, G.; KOLDITZ, O. A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers & Geosciences* 2009; 35:1631–1641.
- WAPLES, D.W.; WAPLES, J.S. A review and evaluation of specific heat capacities of rocks, minerals, and subsurface fluids. Part 1: minerals and nonporous rocks. *Natural Resources Research* 2004a; 13(2):97–122.
- WAPLES, D.W.; WAPLES, J.S. A review and evaluation of specific heat capacities of rocks, minerals, and subsurface fluids. Part 2: fluids and porous rocks. *Natural Resources Research* 2004b; 13(2):123–130.
- WATTS, A.B. Isostasy and flexure of the lithosphere. Cambridge University Press: New York, 2001.
- WEYL, P.K. Pressure solution and the force of crystallization – a phenomenological theory. *Journal of Geophysical Research* 1956; 64:2001–2025.
- WHITE, J.A.; CASTELLETTO, N.; TCHELEPI, H.A. Block-partitioned solvers for coupled poromechanics: a unified framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2016; 303:55–74.
- WHITTAKER, J.M.; GONCHAROV, A. WILLIAMS, S.E.; MÜLLER, R.D.; LEITCHENKOV, G. Global sediment thickness dataset updated for the Australian-Antarctic Southern Ocean. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 2013; 14(8):3297–3305.
- WIKIPEDIA. Earth's internal heat budget. Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Earth%27s_internal_heat_budget>. Acesso em: 05 julho 2016a.

- WIKIPEDIA. Phase diagram. Disponível em:
<https://en.wikipedia.org/wiki/Phase_diagram>. Acesso em: 05 julho 2016b.
- WIKIWAND. Soil mechanics. Disponível em:
<http://www.wikiwand.com/en/Soil_mechanics>. Acesso em: 05 julho 2016.
- WILLIEN F.; CHETVCHENKO, I.; MASSON, R.; QUANDALLE, P.; AGELAS, L.; REQUENA, S. AMG preconditioning for sedimentary basins simulations in Temis calculator. *Marine and Petroleum Geology* 2009; 26:519–524.
- WILSON, D.S. Confirmation of the astronomical calibration of the magnetic polarity timescale from seafloor spreading rates. *Nature* 1993; 364:788–790.
- WILSON, J.T. Did the Atlantic close and then re-open? *Nature* 1966; 211:676–681.
- WOOD, D.M. Soil behaviour and critical state soil mechanics. Cambridge University Press: Cambridge, 1990.
- WOODSIDE, W.; MESSMER, J.H. Thermal conductivity of porous media. I. Unconsolidated sands. *Journal of Applied Physics* 1961a; 32(9):1688–1699.
- WOODSIDE, W.; MESSMER, J.H. Thermal conductivity of porous media. II. Consolidated rocks. *Journal of Applied Physics* 1961b; 32(9):1699–1706.
- WU, G.; WANG, Y.; SWIFT, G.; CHEN, J. Laboratory investigation of the effects of temperature on the mechanical properties of sandstone. *Geotechnical and Geological Engineering* 2013; 31:809–816.
- YANG, X.S. Pressure solution in sedimentary basins: effect of temperature gradient. *Earth and Planetary Science Letters* 2000; 176:233–243.
- YIN, Z.Y.; HICHER, P.Y. Identifying parameters controlling soil delayed behaviour from laboratory and in situ pressuremeter testing. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2008; 32:1515–1535.
- YIN, Z.Y.; HICHER, P.Y.; RIOU, Y.; HUANG, H.W. An elasto-viscoplastic model for soft clay. *Soft and Rock Behavior and Modeling – Proceedings of the GeoShanghai International Conference* 2006; 102:312–319.
- ZAOUI, A. Continuum micromechanics: survey. *Journal of Engineering Mechanics* 2002; 128(8):808–816.
- ZHANG, L.-Y.; MAO, X.-B.; LIU, R.-X.; GUO, X.-Q.; MA, D. The mechanical properties of mudstone at high temperatures: an experimental study. *Rock Mechanics and Rock Engineering* 2014; 47:1479–1484.
- ZHANG, L.-Y.; MAO, X.-B.; LU, A.-H. Experimental study on the mechanical properties of rocks at high temperature. *Science in China Series E: Technological Sciences* 2009; 52(3):641–646.

- ZHANG, X.; SPIERS, C.J. Compaction of granular calcite by pressure solution at room temperature and effects of pore fluid chemistry. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2005; 42:950–960.
- ZHAO, C.; HOBBS, B.E.; WALSH, J.L.; MUHLHAUS, H.B.; ORD, A. Finite element modeling of fluid-rock interaction problems in pore-fluid saturated hydrothermal/sedimentary basins. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2001; 190:2277–2293.
- ZIENKIEWICZ, O.C.; LEWIS, R.W.; STAGG, K.G. Numerical methods in offshore engineering. John Wiley & Sons Ltd: Chichester, 1978.
- ZIENKIEWICZ, O.C.; PAUL, D.K.; CHAN, A.H.C. Unconditionally stable staggered solution procedure for soil-pore fluid interaction problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1988; 26:1039–1055.
- ZIENKIEWICZ, O.C.; TAYLOR, R.L. The Finite Element Method V.1: The Basis. 5th ed. Butterworth-Heinemann: Oxford, 2000.
- ZUO, Z.; EISMA, D.; GIELES, R.; BEKS, J. Accumulation rates and sediment deposition in the northwestern Mediterranean. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography* 1997; 44:597–609.

Apêndice A

Todos os termos necessários referentes as equações (165), (184), (191), (197) e (198) para a implementação computacional do modelo termoporomecânico estão apresentados a seguir.

Matrizes de rigidez

$$\underline{\underline{K}}_{UU} = \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e \cdot \underline{\underline{B}}_{es} dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{UP} = - \int_{V_e} {}^t b \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{1}} \cdot \underline{\underline{N}}_e dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{UT} = -3 \int_{V_e} {}^t K {}^t \alpha^s \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{1}} \cdot \underline{\underline{N}}_e dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{PU} = - \int_{V_e} {}^t b \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_{es} dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{PP} = - \int_{V_e} \frac{1}{{}^t M} \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{N}}_e dV_e - \delta t \int_{V_e} {}^t k^f \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{B}}_e dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{PT} = 3 \int_{V_e} {}^t \alpha^\phi \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{N}}_e dV_e$$

$$\underline{\underline{K}}_{TT} = \int_{V_e} {}^t \rho^t c \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{N}}_e dV_e + \delta t \int_{V_e} {}^t k^t \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{B}}_e dV_e$$

Vetor de forças de deslocamento

$$\begin{aligned}
\underline{F}_U = & -\int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}_e dV_e - \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}_e dV_e \\
& - \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot {}^t \Delta \underline{\underline{C}}_e \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e^{-1} \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}_e^{ne} dV_e - \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot {}^t \Delta \underline{\underline{C}}_e \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e^{-1} \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}_e^{ne} dV_e \\
& + \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e \cdot (\underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^{vp}) dV_e + \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e \cdot (-\underline{\underline{B}}_{es} \cdot \underline{\underline{u}}_e + \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^{vp}) dV_e \\
& + \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{\Sigma}}_e \cdot \underline{\underline{B}}_{ea} \cdot \underline{\underline{u}}_e dV_e + \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot \underline{\underline{\Sigma}}_e \cdot \underline{\underline{B}}_{ea} \cdot \underline{\underline{u}}_e dV_e \\
& + \int_{V_e} {}^t b \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot \underline{\underline{1}} (\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot \underline{\underline{P}}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} {}^t \Delta b \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{1}} [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot (\underline{\underline{P}}_e + {}^t \underline{\underline{p}}_e)] dV_e + \int_{V_e} {}^t \Delta b \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot \underline{\underline{1}} [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot (\underline{\underline{P}}_e + {}^t \underline{\underline{p}}_e)] dV_e \\
& + 3 \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{1}} [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot ({}^t \Delta K {}^t \alpha^{s \ 0t'} \Delta \underline{\underline{T}}_e + {}^t K {}^t \Delta \alpha^{s \ 0t'} \Delta \underline{\underline{T}}_e)] dV_e \\
& + 3 \int_{V_e} \underline{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{H}}_e \cdot \underline{\underline{1}} [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot ({}^t \Delta K {}^t \alpha^{s \ 0t'} \Delta \underline{\underline{T}}_e + {}^t K {}^t \Delta \alpha^{s \ 0t'} \Delta \underline{\underline{T}}_e + {}^t K {}^t \alpha^s \underline{\underline{\Theta}}_e)] dV_e \\
& + \int_{S_e^T} \underline{\underline{N}}_e^T \cdot {}^t \underline{\underline{T}}^d dS_e^T + \int_{V_e} {}^t \rho \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e dV_e \\
& + \int_{V_e} \frac{\rho^f}{{}^t M} \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e (\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot \underline{\underline{P}}_e) (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e \\
& - \int_{V_e} \rho^f \frac{{}^t \Delta M}{{}^t M^2} \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot (\underline{\underline{P}}_e + {}^t \underline{\underline{p}}_e)] (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e \\
& - \int_{V_e} \rho^f ({}^t b - 1) \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e [\underline{\underline{1}}^T \cdot (\underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^p + \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^{vp})] (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} \rho^f {}^t b \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e (\underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_{es} \cdot \underline{\underline{u}}_e) (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} \rho^f {}^t \Delta b \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e (\underline{\underline{1}}^T \cdot {}^t \underline{\underline{C}}_e^{-1} \cdot {}^t \underline{\underline{\sigma}}_e^{ne}) (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e \\
& - 3 \int_{V_e} \rho^f \underline{\underline{N}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e [\tilde{\underline{\underline{N}}}_e \cdot ({}^t \Delta \alpha^{\phi \ 0t'} \Delta \underline{\underline{T}}_e + {}^t \alpha^{\phi} \underline{\underline{\Theta}}_e)] (1 + \underline{\underline{1}}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e) dV_e
\end{aligned}$$

Vetor de forças de pressão

$$\begin{aligned}
\underline{F}_P = & + \int_{V_e} \frac{1}{{}^tM} \tilde{\underline{N}}_e^T (\tilde{\underline{N}}_e \cdot \underline{P}_e) (\underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& - \int_{V_e} \frac{{}^t\Delta M}{{}^tM^2} \tilde{\underline{N}}_e^T \left[\tilde{\underline{N}}_e \cdot (\underline{P}_e + {}^t\underline{p}_e) \right] (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} (1 - {}^tb) \tilde{\underline{N}}_e^T \left[\underline{1}^T \cdot (\underline{\underline{C}}_e^p + \underline{\underline{C}}_e^{vp}) \right] (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} {}^tb \tilde{\underline{N}}_e^T (\underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_{es} \cdot \underline{u}_e) (\underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \int_{V_e} {}^t\Delta b \tilde{\underline{N}}_e^T (\underline{1}^T \cdot {}^t\underline{\underline{C}}_e^{-1} \cdot {}^t\underline{\underline{\sigma}}_e^{ve}) (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& - 3 \int_{V_e} {}^t\Delta \alpha^\phi \tilde{\underline{N}}_e^T (\tilde{\underline{N}}_e \cdot {}^{0t'} \Delta \underline{T}_e) dV_e \\
& - 3 \int_{V_e} \tilde{\underline{N}}_e^T \left[\tilde{\underline{N}}_e \cdot ({}^t\Delta \alpha^\phi {}^{0t'} \Delta \underline{T}_e + {}^t\alpha^\phi \underline{\underline{\Theta}}_e) \right] (\underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \delta t \int_{V_e} {}^tk \tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \tilde{\underline{B}}_e \cdot \underline{P}_e (\underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \delta t \int_{V_e} {}^tk \tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \tilde{\underline{B}}_e \cdot {}^t\underline{p}_e (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& - 2\delta t \int_{V_e} {}^tk \tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{C}}_e \cdot \tilde{\underline{B}}_e \cdot (\underline{P}_e + {}^t\underline{p}_e) (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& - \delta t \int_{V_e} {}^tk \rho^f \tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{g}}_e (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \delta t \int_{V_e} {}^tk \rho^f \tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \underline{\underline{G}}_e \cdot \underline{\underline{g}}_e (1 + \underline{1}^T \cdot \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{u}_e) dV_e \\
& + \delta t \int_{S_e^{q^f}} \tilde{\underline{N}}_e^T {}^tq^{f,d} dS_e^{q^f}
\end{aligned}$$

Vetor de forças de temperatura

$$\begin{aligned}
\underline{F}_T = & -\delta t \int_{V_e} {}^tk {}^t\tilde{\underline{B}}_e^T \cdot \tilde{\underline{B}}_e \cdot {}^t\underline{T}_e dV_e \\
& -\delta t \int_{S_e^{q^t}} \tilde{\underline{N}}_e^T {}^tq^{t,d} dS_e^{q^t} + \delta t \int_{V_e} \tilde{\underline{N}}_e^T {}^tr dV_e
\end{aligned}$$

Demais vetores e matrizes elementares

$$\underline{\underline{N}}_e \rightarrow (3 \times 60)$$

$$\underline{\underline{N}}_e = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & \dots & N_{20} & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & 0 & N_{20} & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & \dots & 0 & 0 & N_{20} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{B}}_e \rightarrow (9 \times 60)$$

$$\underline{\underline{B}}_e = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 \\ \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{U}} = \underline{\underline{u}}_e \rightarrow (60 \times 1)$$

$$\underline{\underline{u}}_e = \begin{bmatrix} u_x^1 & u_y^1 & u_z^1 & \dots & u_x^{20} & u_y^{20} & u_z^{20} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\nabla U}} = \underline{\underline{B}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e \rightarrow (9 \times 1) = (9 \times 60) \times (60 \times 1)$$

$$\underline{\underline{B}}_{es} \rightarrow (9 \times 60)$$

$$\underline{\underline{B}}_{es} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & & 0 & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{B}}_{ea} \rightarrow (9 \times 60)$$

$$\underline{\underline{B}}_{ea} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & & 0 & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & & -\frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \end{bmatrix}$$

$$\{\underline{\underline{\nabla U}}\}_s = \underline{\underline{B}}_{es} \cdot \underline{u}_e \rightarrow (9 \times 1) = (9 \times 60) \times (60 \times 1)$$

$$\{\underline{\underline{\nabla U}}\}_a = \underline{\underline{B}}_{ea} \cdot \underline{u}_e \rightarrow (9 \times 1) = (9 \times 60) \times (60 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}_e \rightarrow (9 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_e = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{yy} & \sigma_{zz} & \sigma_{xy} & \sigma_{yz} & \sigma_{xz} & \sigma_{yx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zx} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^{te} = \underline{\underline{\sigma}}_e^{te} \rightarrow (9 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_e^{te} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx}^{te} & \sigma_{yy}^{te} & \sigma_{zz}^{te} & \sigma_{xy}^{te} & \sigma_{yz}^{te} & \sigma_{xz}^{te} & \sigma_{yx}^{te} & \sigma_{zy}^{te} & \sigma_{zx}^{te} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p = \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^p \rightarrow (9 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^p = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{xx}^p & \mathcal{E}_{yy}^p & \mathcal{E}_{zz}^p & \mathcal{E}_{xy}^p & \mathcal{E}_{yz}^p & \mathcal{E}_{xz}^p & \mathcal{E}_{yx}^p & \mathcal{E}_{zy}^p & \mathcal{E}_{zx}^p \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{vp} = \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^{vp} \rightarrow (9 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}_e^{vp} = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{xx}^{vp} & \mathcal{E}_{yy}^{vp} & \mathcal{E}_{zz}^{vp} & \mathcal{E}_{xy}^{vp} & \mathcal{E}_{yz}^{vp} & \mathcal{E}_{xz}^{vp} & \mathcal{E}_{yx}^{vp} & \mathcal{E}_{zy}^{vp} & \mathcal{E}_{zx}^{vp} \end{bmatrix}$$

$$\underline{T}^d \rightarrow (3 \times 1)$$

$$\underline{T}^d = \begin{bmatrix} T_x^d & T_y^d & T_z^d \end{bmatrix}$$

$$\underline{g} = \underline{g}_e \rightarrow (3 \times 1)$$

$$\underline{g}_e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -9.806 \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}_e \rightarrow (9 \times 9)$$

$$\underline{\underline{C}}_e = \begin{bmatrix} (\lambda+2\mu) & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & (\lambda+2\mu) & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & (\lambda+2\mu) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{C}}^{-1} = \underline{\underline{C}}_e^{-1} \rightarrow (9 \times 9)$$

$$\underline{\underline{C}}_e^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\lambda+\mu}{\mu(3\lambda+2\mu)} & -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & \frac{\lambda+\mu}{\mu(3\lambda+2\mu)} & -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & -\frac{1}{2} \frac{\lambda}{\mu(3\lambda+2\mu)} & \frac{\lambda+\mu}{\mu(3\lambda+2\mu)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\mu} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\Gamma}} = \underline{\underline{H}}_e \rightarrow (9 \times 9) = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 & C \\ 0 & E & 0 & D & 0 & 0 & 0 & F & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 & H & G & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & A & 0 & 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & F & 0 & E & D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 & B & A & 0 & 0 & 0 \\ D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E & 0 & F \\ 0 & H & 0 & G & 0 & 0 & 0 & I & 0 \\ G & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H & 0 & I \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} A &= \left(\frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) & B &= -\frac{\partial U_x}{\partial y} & C &= -\frac{\partial U_x}{\partial z} \\ \text{Onde: } D &= -\frac{\partial U_y}{\partial x} & E &= \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) & F &= -\frac{\partial U_y}{\partial z} \\ G &= -\frac{\partial U_z}{\partial x} & H &= -\frac{\partial U_z}{\partial y} & I &= \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

Obtidos a partir de: $\underline{\underline{h}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e \rightarrow (9 \times 1) = (9 \times 60) \times (60 \times 1)$

$$\underline{\underline{h}}_e \cdot \underline{\underline{u}}_e = [A \quad B \quad C \quad D \quad E \quad F \quad G \quad H \quad I]$$

$$\underline{\underline{h}}_e = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial z} & & & & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} \\ -\frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & & & & -\frac{\partial N_{20}}{\partial y} & 0 & 0 \\ -\frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & & & & -\frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & & & & 0 & -\frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \dots & & & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} \\ 0 & -\frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & & & & 0 & -\frac{\partial N_{20}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\partial N_1}{\partial x} & & & & 0 & 0 & -\frac{\partial N_{20}}{\partial x} \\ 0 & 0 & -\frac{\partial N_1}{\partial y} & & & & 0 & 0 & -\frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & & & & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\left\{ \underline{\underline{\nabla U}} \right\}_a \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}} \cdot \left\{ \underline{\underline{\nabla U}} \right\}_a = -\underline{\underline{\Sigma}}_e \cdot \underline{\underline{B}}_{ea} \cdot \underline{\underline{u}}_e \rightarrow (9 \times 1) = (9 \times 9) \times (9 \times 60) \times (60 \times 1)$$

$$-\underline{\underline{\Sigma}}_e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & (\sigma_{xy} + \sigma_{yx}) & 0 & (\sigma_{xz} + \sigma_{zx}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (\sigma_{yz} + \sigma_{zy}) & 0 & (\sigma_{xy} + \sigma_{yx}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (\sigma_{yz} + \sigma_{zy}) & (\sigma_{xz} + \sigma_{zx}) \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{xz} & \sigma_{zy} & \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{zz} & 0 & \sigma_{xz} & \sigma_{yy} & \sigma_{yx} \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{yz} & 0 & \sigma_{zz} & 0 & \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{zx} & \sigma_{yz} & \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{zz} & 0 & \sigma_{zx} & \sigma_{yy} & \sigma_{xy} \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{zy} & 0 & \sigma_{zz} & 0 & \sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\tilde{N}}}_e \rightarrow (1 \times 8)$$

$$\underline{\underline{\tilde{N}}}_e = [\underline{\underline{\tilde{N}}}_1 \quad \dots \quad \underline{\underline{\tilde{N}}}_8]$$

$$\underline{\underline{\tilde{B}}}_e \rightarrow (3 \times 8)$$

$$\underline{\underline{\tilde{B}}}_e = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial x} & \frac{\partial \tilde{N}_8}{\partial x} \\ \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial y} & \dots & \frac{\partial \tilde{N}_8}{\partial y} \\ \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial z} & \frac{\partial \tilde{N}_8}{\partial z} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\nabla U}} \cdot \underline{\underline{g}} = \underline{\underline{G}}_e \cdot \underline{\underline{g}}_e \rightarrow (3 \times 1) = (3 \times 3) \times (3 \times 1)$$

$$\underline{\underline{G}}_e = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_x}{\partial x} & \frac{\partial U_x}{\partial y} & \frac{\partial U_x}{\partial z} \\ \frac{\partial U_y}{\partial x} & \frac{\partial U_y}{\partial y} & \frac{\partial U_y}{\partial z} \\ \frac{\partial U_z}{\partial x} & \frac{\partial U_z}{\partial y} & \frac{\partial U_z}{\partial z} \end{bmatrix}$$

$$\underline{P} = \underline{P}_e \rightarrow (8 \times 1)$$

$$\underline{P}_e = [P_1 \quad \cdots \quad P_8]$$

$$P = \tilde{N}_e \cdot \underline{P}_e \rightarrow (1 \times 1) = (1 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{\nabla} P = \tilde{B}_e \cdot \underline{P}_e \rightarrow (3 \times 1) = (3 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{p}_e \rightarrow (8 \times 1)$$

$$\underline{p}_e = [p_1 \quad \cdots \quad p_8]$$

$$p = \tilde{N}_e \cdot \underline{p}_e \rightarrow (1 \times 1) = (1 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{\nabla} p = \tilde{B}_e \cdot \underline{p}_e \rightarrow (3 \times 1) = (3 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}} = \underline{\underline{\mathcal{E}}}_e \rightarrow (3 \times 3)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}_e = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{xx} & \mathcal{E}_{yx} & \mathcal{E}_{zx} \\ \mathcal{E}_{xy} & \mathcal{E}_{yy} & \mathcal{E}_{zy} \\ \mathcal{E}_{xz} & \mathcal{E}_{yz} & \mathcal{E}_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{1}} = \underline{\underline{1}} \rightarrow (9 \times 1)$$

$$\underline{\underline{1}} = [1 \quad 1 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]$$

$$\underline{\Theta}_e \rightarrow (8 \times 1)$$

$$\underline{\Theta}_e = [\Theta_1 \quad \cdots \quad \Theta_8]$$

$$\Theta = \underline{\tilde{N}}_e \cdot \underline{\Theta}_e \rightarrow (1 \times 1) = (1 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{\nabla} \Theta = \underline{\tilde{B}}_e \cdot \underline{\Theta}_e \rightarrow (3 \times 1) = (3 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{T}_e \rightarrow (8 \times 1)$$

$$\underline{T}_e = [T_1 \quad \cdots \quad T_8]$$

$$T = \underline{\tilde{N}}_e \cdot \underline{T}_e \rightarrow (1 \times 1) = (1 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$$\underline{\nabla} T = \underline{\tilde{B}}_e \cdot \underline{T}_e \rightarrow (3 \times 1) = (3 \times 8) \times (8 \times 1)$$

$${}^{0r'} \Delta \underline{T}_e \rightarrow (8 \times 1)$$

$${}^{0r'} \Delta \underline{T}_e = [{}^{0r'} \Delta T_1 \quad \cdots \quad {}^{0r'} \Delta T_8]$$

$${}^{0r'} \Delta T = \underline{\tilde{N}}_e \cdot {}^{0r'} \Delta \underline{T}_e \rightarrow (1 \times 1) = (1 \times 8) \times (8 \times 1)$$