9 Ajuste de parâmetros para modelagem de rocha

O primeiro passo, para validar a qualidade física do modelo proposto, consiste em estabelecer a relação entre as propriedades físicas dos materiais a serem simulados e os parâmetros do modelo durante a simulação.

Nessa seção é discutida uma metodologia, que serve de guia para determinar os parâmetros a fim de calibrar o modelo para um determinado material.

É necessária uma maneira de determinar a resposta física do modelo para um determinado conjunto de parâmetros durante a simulação. Vamos chamar de macro-resposta o valor de uma propriedade que é medida no modelo e micro-parâmetro é o nome dado a um parâmetro usado no modelo.

Um teste bastante utilizado para determinar a resposta da rocha é o teste de pressão uniaxial que iremos estudar em seguida.

9.1 Teste uniaxial

Esse teste determina diversas propriedades globais de uma amostra de material (macro-respostas), em particular, esse teste determina o módulo de Young e a resistência máxima do material.

A configuração geométrica do teste uniaxial é mostrada na porção esquerda da figura (9.1). Placas compressoras se movem, relativamente em sentidos opostos, esmagando o material, e durante a compressão, um mecanismo sensor mede a pressão na direção vertical.

O produto principal desse teste é a curva de "*strain stress*". Essa curva mostra a relação entre a compressão do material e a pressão atuando nessa direção. Um exemplo de uma curva de "*strain stress*" é a curva mostrada na parte direita da figura (9.1).

Em um material duro, a curva atinge um ponto máximo, momentos antes de a amostra fraturar por completo. Esse ponto determina a resistência máxima do material. E a inclinação da parte linear determina o módulo de Young do material.

Um exemplo de simulação do teste uniaxial é exibido na figura (9.2), onde são apresentados os vários estágios intermediários, até o completo rompimento



Figura 9.1: Esquerda: configuração geométrica do teste uniaxial. Centro: definições geométricas da amostra, quanto mais comprimida maior o valor de l e menor de L. Direita: Exemplo de curva de strain stress.

da rocha, veja figura (9.2).

Para gerar a curva de "*strain stress*", a cada passo de tempo, calculamos a altura atual da amostra e a força que esta sendo exercida sobre a base da amostra.

A força atuando na base é a soma das forças exercidas sobre as partículas que compõem a placa inferior. Os resultados são armazenados, e posteriormente a curva de "*strain stress*" é gerada. Um exemplo do resultado é mostrado no quado de baixo da figura (9.3).

9.2

Determinando os parâmetros do modelo

Utilizando o teste uniaxial conseguimos medir a resposta do modelo para um determinado conjunto de micro-parâmetros. Com isso, será realizada uma análise paramétrica para entender a relação entre os micro-parâmetros do contato geométrico e as macro-respostas obtidas do teste uniaxial. Para realizar esses testes utilizamos a seguinte metodologia.

Primeiro escolhemos um material em que estamos interessados e que conhecemos as macro-respostas. Vamos utilizar como exemplo o granito Augig. Escolhemos esse material pois ele já foi bastante estudado e é relativamente fácil encontrar na literatura os valores de suas propriedades físicas. Algumas das propriedades estão na tabela a seguir:



Figura 9.2: Simulação do teste uniaxial, linhas claras representam contatos com maior tensão, as linhas em vermelho representam os contatos que estão se rompendo.



Figura 9.3: Topo: Pressão versus Tempo, a reta vertical mostra o ponto que determina a resistência máxima da amostra. Meio: Contagem de contatos quebrados. Perceba a relação entre a pressão e o número de quebras. Base: A curva de strain stress.

Macro-respostas do granito Augig

Módulo de Young	$25800~\mathrm{MPa}$
Poisson	0.23
Densidade	$2750~{\rm Kg/m^3}$
Resistência Máxima	$122.1 \mathrm{MPa}$

Em seguida determinamos os raios das esferas que serão utilizados para gerar o modelo. Para determinar o raio nos baseamos no trabalho de Kazerane e Zhao de 2010 (39), segundo esse autor, o raio deve ser escolhido de maneira que ele seja suficientemente pequeno para representar a geometria das fraturas. Para o caso do granito Augig o raio deve ser de 4mm.

Com esses parâmetros determinados vamos gerar uma amostra cilíndrica de material seguindo o processo de gênese de material descrito na seção 6.1. Construímos um cilindro tridimensional com 48 mm de raio (12 partículas) e 192 mm de altura (48 partículas).



Figura 9.4: Estudo paramétrico da macro-resposta em função dos microparâmetros: Na parte superior, temos a Resistência Máxima do material em função dos micro-parâmetros de contato. Na porção inferior, é exibido a resposta para o módulo de Young em função dos micro-parâmetros de contato.

Com esse modelo de cilindro podemos realizar um estudo paramétrico das micro-propriedades do modelo de contato do GBPM. Fazemos isso varrendo o espaço de parâmetros. No caso do modelo de contato geométrico, existem dois micro-parâmetros: \tilde{k} constante elástica, do contato geométrico e $\tilde{\sigma}$ resistência do contato geométrico.

O resultado dessa análise é exibido na figura 9.4. Na porção superior dessa figura temos a variação da Resistência máxima em função de $\tilde{k} \in \tilde{\sigma}$. E na porção inferior a variação do Módulo de Young em função de $\tilde{k} \in \tilde{\sigma}$.

A primeira conclusão que podemos tirar é que o Módulo de Young macro depende apenas do parâmetro \tilde{k} . Dessa maneira conseguimos determinar o parâmetro \tilde{k} que determina a macro-resposta do módulo de Young para o granito Augig.

A segunda conclusão é que a resistência do material varia quase linearmente com o parâmetro $\tilde{\sigma}$ para \tilde{k} está fixo. Dessa forma conseguimos determinar o parâmetro $\tilde{\sigma}$ também para conseguir a macro-resposta da Resistência Máxima para o granito Augig.

Colocamos todos os valores dos micro-parâmetros utilizados para simular o granito Augig na tabela seguinte:



Figura 9.5: Correlação entre a força máxima e a quebra dos contatos geométricos: No gráfico superior, a pressão na base em relação ao tempo. No gráfico inferior é exibida a contagem de quebras em relação ao tempo.

Micro-parâmetros do modelo

million parametros de medero	
Passo de tempo	$10^{-5}\mathrm{s}$
Densidade	$2750~\mathrm{kg}/\mathrm{m}^3$
Modelo de força normal	Grãos viscos-elásticos
Constante dissipativa A	0.5
Módulo de Young Y	25800 MPa
Poisson ν	0.23
Modelo de força tangente	Modelo de Haff and Werner
Coeficiente de atrito de Coloumb μ	10^{-1}
Parâmetro de rugos idade tangente γ^t	10^{-1}
Parâmetro elástico do contato \widetilde{k}	14.1×10^6
Parâmetro de resistência do contato $\widetilde{\sigma}$	28.2×10^3

Na figura 9.5 temos duas curvas, a superior mostra a pressão na base do cilindro em relação ao tempo simulado. A curva na parte inferior mostra o número de contatos quebrados durante a simulação. A relação, entre essas duas curvas, é direta: Assim que o material começa fraturar sua resistência cai drasticamente.

A curva de strain-stress para esse conjunto de parâmetros é comparada com o o resultado de Kazerane e Zhao (39) e com a curva obtida em laboratório do granito Augig. O resultado dessa comparação é apresentado na figura 9.6.

A curva gerada pelo nosso método certamente é melhor que a do artigo de Kazerane e Zhao, que utilizaram um método em 2D com poliedros e computacionalmente muito mais caro. A nossa curva não passa no ponto (0,0)como a do material em laboratório pois existe um espaço a ser preenchido entre



Figura 9.6: A curva gerada pelo nosso método proposto se asemelha mais ao teste em laboratório do que a do artigo de Kazerane e Zhao, que utilizaram um método em 2D com poliedros e computacionalmente muito mais caro. A nossa curva não passa no ponto (0,0) como a do material em laboratório pois existe um espaço a ser preenchido entre as partículas do cilindro com as partículas da base e leva um pouco de tempo até que essas esferas se acomodem.

as partículas do cilindro com as partículas da base e leva um pouco de tempo até que essas esferas se acomodem.

E depois que acontece a quebra do material, a física que começa a dominar a simulação é a física de contato partícula-partícula e como utilizamos os parâmetros físicos e equações onde esses parâmetros possuem interpretação, foi o que tornou possível o modelo se aproximar da física da rocha.