

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

PEDRO ROMERO ROCHA BERNARDES

**MODELAGEM HIDRO-GEOQUÍMICA DA FORMAÇÃO DE CARSTE EM  
ROCHAS SOLÚVEIS**

Recife

2018

PEDRO ROMERO ROCHA BERNARDES

**MODELAGEM HIDRO-GEOQUÍMICA DA FORMAÇÃO DE CARSTE EM  
ROCHAS SOLÚVEIS**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Civil.

Área de concentração: Simulação e Gerenciamento de Reservatório de Petróleo.

Orientador: Prof. Dr. Igor Fernandes Gomes.

Recife

2018

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Margareth Malta, CRB-4 / 1198

B522m Bernardes, Pedro Romero Rocha.  
Modelagem hidro-geoquímica da formação de carste em rochas solúveis / Pedro Romero Rocha Bernardes. – 2018.  
67 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Igor Fernandes Gomes.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2018.  
Inclui Referências.

1. Engenharia Civil. 2. Carste. 3. Transporte reativo. 4. Elementos finitos. 5. Acoplamento hidroquímico. I. Gomes, Igor Fernandes. (Orientador). II. Título.

UFPE

624 CDD (22. ed.)

BCTG/2019-23



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO - UFPE  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

A comissão examinadora da defesa de dissertação de mestrado

**MODELAGEM HIDRO-GEOQUÍMICA DA FORMAÇÃO DE CARSTE EM  
ROCHAS SOLÚVEIS**

Defendida por

Pedro Romero Rocha Bernardes

Considerado o candidato APROVADO

Recife, 31 de agosto de 2018

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Igor Fernandes Gomes – UFPE  
(Orientador)

---

Dr. Jonathan da Cunha Teixeira – UFPE  
(Examinador externo)

---

Prof. Dr. José Antônio Barbosa – UFPE  
(Examinador interno)

## AGRADECIMENTOS

À minha mãe, por todo amor, carinho, atenção e dedicação. E por sempre mostrar a importância do estudo.

Ao meu pai por todo amor, ensinamentos e conselhos. E por vibrar tanto em cada vitória.

Ao meu irmão Vitor, que sempre muito sábio, me ajudou a tomar decisões importantes no âmbito acadêmico e pessoal.

À minha esposa Fernanda, por todo apoio, incentivo e motivação.

Ao prof.IVALDO, por todo apoio e motivação, por ser sempre uma pessoa tão paciente e alegre. Pela oportunidade que me concedeu de realizar iniciação científica. Serei eternamente grato por tudo.

Ao prof. IGOR, por todo apoio e motivação, pelos materiais disponibilizados, por todas as dúvidas tiradas e por sempre estar disponível e por todo conhecimento transmitido.

Ao Prof. LEONARDO, por todas as dúvidas tiradas e pelo conhecimento transmitido.

À Jonathan, pela ajuda, dúvidas tiradas, e conhecimento transmitido.

Ao meu amigo Lucíolo Victor, obrigado por toda ajuda, por todo incentivo, pelos materiais disponibilizados, por se dedicar tanto em me ajudar em todo momento que precisei e pela tão sincera amizade.

Ao Prof. MARINÉSIO, pela amizade e por toda ajuda e disponibilidade.

A prof. LÍCIA por toda ajuda e dedicação.

A todo o grupo do Lmcg o qual tive a oportunidade de criar grandes amizades como Marinésio, Tiago, Jean, Bruno, Nayara, Lady Laura, Karine, Ricardo, Shirley, Jeferson, Nina,IVALDO, Felipe, Sajan e Daniel.

A Brito que sempre esteve disponível e pela ajuda.

A Rose, Andréa e Priscila da secretaria da pós-graduação por toda ajuda e amizade.

Agradeço à Capes pelo incentivo financeiro, à UFPE e ao LMCG pelo apoio institucional.

## RESUMO

Nos últimos anos têm-se observado crescentes estudos voltados a reservatórios naturalmente fraturados na indústria do petróleo. Geralmente, a presença de fraturas impacta a produção de óleo uma vez que cria uma alta heterogeneidade e anisotropia hidráulica e mecânica na rocha. Isto é ainda potencializado, especialmente em reservatórios carbonáticos e em rochas evaporíticas, pela formação de cavidades por dissolução da rocha, seja em virtude do escoamento de água hidrotermal, meteórica ou de fluidos injetados. A estas cavidades dá-se o nome de feições cársticas ou carste. Diante disso, torna-se necessária a predição de ocorrência destas feições bem como de sua geometria de forma que estas possam ser contempladas em um modelo geológico que possa incluir diferentes configurações de sistema de fratura-rocha e de carstificação. Portanto, neste trabalho propõe-se simular numericamente a formação e evolução de carste em cenários sintéticos de rocha evaporítica (gipsita) devido ao fluxo de fluido em fraturas. Para isso empregou-se uma formulação de transporte reativo em um programa em elementos finitos que resolve o problema hidráulico e químico de forma acoplada. À medida que o fluido com baixa concentração de minerais solúveis entra em contato com a rocha reativa, esta sofre dissolução levando a um conseqüente aumento da porosidade e permeabilidade, formando-se assim o carste. O modelo empregado para análise química, com a formulação de transporte reativo, deriva da equação de balanço de massa de cada uma das espécies presentes no meio. As equações finais de transporte independentes são obtidas usando as restrições provenientes das diversas reações químicas reversíveis (suposição de equilíbrio químico). Neste trabalho o programa foi inicialmente testado em um caso de sensibilidade e posteriormente foram simulados dois problemas sintéticos, baseados em observações de afloramentos com feições cársticas, para os quais se observou a formação do carste bem como as geometrias de carste. Verificou-se que o processo de carstificação modifica a matriz permoporosa da rocha o que deve influenciar o regime de fluxo e pode levar a impactos geomecânicos em virtude das deformações que poderão ocorrer pelo alívio de tensões induzido pelo carste.

Palavras-chave: Carste. Transporte reativo. Elementos finitos. Acoplamento hidroquímico.

## ABSTRACT

In recent years, studies have focused on naturally fractured reservoirs in oil industry and hydrogeology. In a broad sense, the presence of fractures impacts oil production, since it generate high heterogeneity and hydraulic and mechanical anisotropy on the rock. This is further potentialized, especially in carbonate reservoirs and evaporitic rocks, by the formation of cavities by rock dissolution, either by hydrothermal, meteoric or injected fluid flow. These cavities are called karstic or karst features. Therefore, it is necessary to predict the occurrence of these features as well as their geometry so that they can be contemplated in a geological model in function of different fracture-rock settings. Consequently, this work proposes to simulate numerically the formation and evolution of karst in synthetic scenarios of evaporite rock (gypsite) due to fluid flow in fractures. For this, it is employed a reactive transport formulation in a finite elements program that solves the hydraulic and chemical problems in a coupled manner. As the fluid with low concentration of soluble minerals comes into contact with the reactive rock, the latter undergoes dissolution leading to a resulting increase in porosity and permeability, thus forming karst. The model used for chemical analysis derives from the equation of mass balance of each of the species present in the porous media. Independent final transport equations are obtained using the constraints from various reversible chemical reactions (local equilibrium assumption). In this work the program was initially validated and then two synthetic problems were simulated, based on observations in analogous carbonate outcrops and diagram blocks of fractured environment and with karstic features, for which the karst formation as well as karst geometries were observed. It was verified that the karsification process modifies the permoporous matrix of the rock, which should influence the flow regime and may lead to geomechanical impacts due to deformations that may occur due to stress decrease provided by karst.

Keywords: Karst. Reactive transport. Finite elements. Hydrochemical modeling.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Componentes principais do sistema cárstico.....	17
Figura 2 –	Formação de carste em sistemas hidrológicos diferentes.....	20
Figura 3 –	Etapas da formação da caverna hipogênica.....	22
Figura 4 –	Dolina de colapso.....	23
Figura 5 –	Caso 1 - características e malha em elementos finitos.....	39
Figura 6 –	Caso 1 – Posicionamento dos materiais reativos e inerte.....	40
Figura 7 –	Caso1 – Condições iniciais de porosidade.....	41
Figura 8 –	Caso 1 – Evolução da concentração de mineral reativo (X5).....	42
Figura 9 –	Caso 1 – Evolução da porosidade para alguns espaços de tempo.....	42
Figura 10 –	Caso 2 - Modelo sintético de análogo de reservatório fraturado: características e malha em elementos finitos.....	43
Figura 11 –	Caso2 - Condição de contorno de fluxo descendente no topo da fratura.....	44
Figura 12 –	Caso 2 – fluxo descendente no topo da fratura vertical: Concentração total de minerais de gipsita (X5) após 3 dias.....	45
Figura 13 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: a) Concentração de mineral após 3 dias; b) evolução da concentração do mineral no sentido do fluxo e na direção normal a fratura principal.....	46
Figura 14 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Variação da porosidade em relação a inicial (deltaporo) após 3 dias.....	47
Figura 15 -	Caso 2 – Forma de dissolução a partir de fluxo descendente: (a) nós analisados na variação da porosidade inicial (delta poro), (b) evolução do deltaporo.....	47
Figura 16 –	Zonas de dissolução observadas em afloramentos de Fm. Crato-CE e Fm. Jandaira-RN: análise qualitativa da simulação	48

	numérica.....	
Figura 17 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: (a) nós analisados na variação da permeabilidade (Logperm), (b) evolução da permeabilidade.....	49
Figura 18 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Variação da pressão de líquido após 3 dias.....	49
Figura 19 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Evolução da pressão de líquido.....	50
Figura 20 –	Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: vetores de fluxo de fluido.....	50
Figura 21 –	Fluxo normal ao plano de análise: Condição de contorno de fluxo.....	51
Figura 22 –	Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Concentração do mineral após 1 dia de análise, Identificação da posição dos nós utilizados para a análise. (b) gráfico da evolução da concentração do mineral.....	51
Figura 23 –	Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) deltaporo (%) (b) evolução da porosidade nos pontos analisados.....	52
Figura 24 –	Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Variação da permeabilidade após 1 dia, (b) evolução da permeabilidade nos pontos analisados.....	53
Figura 25 –	Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: Variação da pressão de líquido em toda a malha após 1 dia.....	53
Figura 26 –	Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Variação da pressão de líquido nos pontos analisados após 1 dia, (b) evolução da pressão de líquido no sentido do fluxo e na direção normal a fratura principal.....	54
Figura 27 –	Vetores de fluxo de fluido.....	54
Figura 28 –	Condição de contorno de fluxo.....	55
Figura 29 –	Fluxo normal ao plano de análise: (a) variação da concentração de mineral X5, (b) variação da porosidade (deltaporo), (c) Variação do logaritmo da permeabilidade (Logperm), (d)	56

	variação da pressão de líquido (PL).....	
Figura 30 –	Zonas de dissolução observadas em afloramentos das Formações Crato-CE (figura a) e Jandaíra-RN (figura b): análise qualitativa da simulação numérica.....	57
Figura 31 –	Modelo geológico, com fratura horizontal com uma certa curvatura por conta do dobramento da formação: (a) características e malha em elementos finitos, (b) detalhe do encontro das fraturas.....	58
Figura 32 –	Caso 4 - Condições de contorno de fluxo.....	59
Figura 33 –	Caso 4 - Concentração total de minerais de gipsita (X5).....	60
Figura 34 –	Caso 4 – (a) Concentração total de minerais de gipsita e pontos a serem analisado, (b) Evolução da concentração do mineral.....	60
Figura 35 –	Caso 4 – Variação da porosidade em relação a inicial ( $\Delta$ poro) após 200 dias.....	61
Figura 36 –	Caso 4 – (a) Variação da porosidade ( $\Delta$ poro) nos nós analisados, (b) evolução do $\Delta$ poro.....	61
Figura 37 –	Comparação da geometria obtida no caso com zonas de dissolução observadas em afloramentos da caverna, formada em gipsita, Optymistychna, localizada na Ucrânia.....	62
Figura 38 –	Feições da karst correlacionadas com dobramentos existente na formação das cavernas Toca da Boa Vista (TBV) e Toca da Barriguda (TBR).....	63
Figura 39 –	Caso 4 – Variação da permeabilidade após 200 dias.....	64
Figura 40 –	Caso 4 – (a) Pontos escolhidos para análise da permeabilidade, (b) evolução da permeabilidade.....	64
Figura 41 –	Caso 4 – Variação da pressão de líquido.....	65
Figura 42 –	Evolução da pressão de líquido.....	65
Figura 43 –	Caso 4 – Fluxo ascendente: vetores de fluxo de fluido.....	66
Figura 44 –	Condições de contorno.....	66

Figura 45 –	Caso 05 - Concentração de minerais reativos.....	67
Figura 46 –	Caso 5 – Pontos selecionados para análise da concentração de mineral gipsita.....	67
Figura 47 –	Caso 5 – Variação da porosidade em relação a inicial (deltaporo) após 100 dias.....	68
Figura 48 –	Caso 5 – (a) Variação da porosidade (deltaporo) nos nós analisados, (b) evolução do deltaporo.....	68
Figura 49 –	Caso 5 - (a) Pontos escolhidos para análise da permeabilidade, (b) evolução da permeabilidade.....	69
Figura 50 –	Caso 5 - Variação da pressão de liquido.....	70
Figura 51 –	Evolução da pressão de liquido.....	70
Figura 52 –	Linhas de fluxo.....	71

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>12</b>
1.1	CONSIDERAÇÕES INICIAIS.....	12
1.2	OBJETIVO DO TRABALHO.....	14
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO.....	15
<b>1.2.1</b>	<b>Geral.....</b>	<b>14</b>
<b>1.2.2</b>	<b>Específico.....</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>16</b>
2.1	CARSTE .....	16
2.2	HIDROGEOQUÍMICA .....	24
2.3	TRANSPORTE REATIVO.....	25
<b>3</b>	<b>FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....</b>	<b>30</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>38</b>
4.1	CASO 01: DISSOLUÇÃO DE ROCHA GIPSITA – MODELO 1D.....	39
4.2	CASO 02: SIMULAÇÃO DE CARSTE EPIGÊNICO.....	43
4.3	CASO 03: CARSTIFICAÇÃO POR UM FLUXO NORMAL AO PLANO DE ANÁLISE.....	50
4.4	CASO 04: SIMULAÇÃO DE CARSTE HIPOGÊNICO EM REGIÃO COM DOBRA ANTICLINAL.....	57
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>62</b>
5.1	CONCLUSÕES.....	72
5.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	73
	<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>74</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será abordado as considerações iniciais do trabalho, objetivos e a estrutura da dissertação.

### 1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS.

O petróleo é considerado o principal combustível não renovável e é insumo para a produção de diversos produtos industriais, tais como borracha, solventes, fertilizantes, tecidos, etc. Sendo uma fonte de energia de grande importância geopolítica, por ter uma grande facilidade de ser transportado ao redor do mundo e dado este se constituir na base da economia produtiva mundial. Assim, o país que detém e controla suas reservas petrolíferas e que mantém uma estrutura adequada de refino auferir vantagens competitivas, quer seja em relação à segurança interna dos setores vitais à economia, como transporte e produção de eletricidade e, por conseguinte, conferindo competitividade à indústria, quer seja em relação à sua participação no comércio internacional ou por meio da exportação direta do óleo e seus derivados

O petróleo é formado através da decomposição de matéria orgânica em formações sedimentares chamada de rocha reservatório, sendo necessário apresentar poros (espaços vazios que podem ser preenchidos por fluidos) e estes poros devem estar interconectados, de modo que a rocha seja permeável à passagem dos fluidos. A maior parte das reservas conhecidas de petróleo é encontrada em arenitos e rochas calcárias em que o óleo pode se acumular. Por se tratar de uma fonte de energia não renovável, aumenta a importância da descoberta de novos reservatórios e aprimorar o conhecimento de exploração para maximizar a produção nos reservatórios existentes.

Um meio para o melhor entendimento dos reservatórios de petróleo é a utilização de modelos análogos para o entendimento de processos e fenômenos físicos, assim como a determinação de características de materiais é um ramo da ciência bastante explorado. Uma das áreas onde os modelos análogos são bastante utilizados é a geologia, tendo em vista que o acesso às estruturas geológicas subterrâneas só é possível através de amostragem ou de processos indiretos. Sendo assim a observância de estruturas aflorantes que possuem propriedades similares às estruturas de interesse é utilizada por geólogos, engenheiros e cientistas de diversas áreas da geologia. Miranda et al. (2012) e Miranda et al. (2018)

discutem sobre a adoção de afloramentos análogos nas modelagens geológica e numérica voltadas à engenharia de reservatórios de petróleo.

Outra ferramenta importante para a predição de fenômenos naturais e desenvolvidos pelo homem é a simulação numérica, que é a única possibilidade de resolver problemas complexos quando não é possível a utilização de métodos analíticos, estatísticos ou experimentais (Skiba, 2005). A simulação numérica, além de ter seu emprego em diversas áreas da engenharia, entre outras, pode também permitir a modelagem de processos geológicos, que possuem características geométricas e físicas complexas que inviabilizam sua solução por procedimentos analíticos naturais. Um dos processos que se têm observado em estruturas geológicas reativas, ou seja, que sofrem influência química de fluidos com certas características que percola por seus poros, é a formação de cavidades oriundas da dissolução dessas estruturas. A esse tipo de cavidade é dado o nome de karst ou carste, que é um tipo de relevo geológico formado pela dissolução química de formações como carbonatos e evaporitos. A sua ocorrência leva ao aparecimento de uma série de características físicas na formação rochosa tais como dolinas, cavernas, vales secos, rios subterrâneos etc.

No contexto da Engenharia de reservatórios, ou até mesmo da hidrogeologia, as feições cársticas geram heterogeneidades que precisam ser levadas em conta na simulação numérica. Nestas o fluxo de fluido, por não se tratar de um meio poroso em escala onde se pode considerar a Lei de Darcy, precisa ser resolvido a partir de formulações da equação de Navier Stokes, onde, dependendo da situação, o fluxo pode ser até mesmo turbulento. Também pode ser observada a descontinuidade da matriz porosa onde, durante o seu processo de formação, muda-se o campo de tensões local e até mesmo global do meio.

Porém, durante o processo de carstificação ou ao longo da formação da bacia sedimentar, pode-se observar a geração de brechas de colapso caracterizadas pela ruptura da região sobre o carste devido ao alívio de tensões promovido pela carstificação. Neste caso, o carste se apresenta preenchido por material rochoso fragmentado e, a depender da escala de modelagem, o fluxo de fluido no seu interior pode ser tratado pela Lei de Darcy.

Diante disso, torna-se importante a predição de regiões de potencial formação e ocorrência de carste bem como a sua geometria, uma vez que tais informações podem ser consideradas em um modelo geomecânico que venha a predizer a formação de zonas de colapso bem como pode possibilitar estimar a distribuição espacial destas zonas ao longo do reservatório.

Portanto, o relevo cárstico forma uma das paisagens mais impressionantes em todo mundo, mas é um grande desafio relacionado ao problema de engenharia, relativo ao tópico de produção de poços de petróleo pois possui várias incertezas associadas, pois a natureza da porosidade e permeabilidade das rochas solúveis são variáveis. Nos dados obtidos por sondagens indiretas, em reservatórios onde aconteceram processos de colapso da matriz rochosa por conta do processo de cárstificação, é verificada uma heterogeneidade nos resultados que dificulta obtenção de informações, como por exemplo a geometria das cavidades antes do colapso. Então é um assunto que cada vez mais tem sido alvo de pesquisa pois é de suma importância para mercado petrolífero para melhorar a eficiência de exploração.

Diante do exposto, esse trabalho consiste na simulação numérica da formação (gênese) de carste empregando uma formulação de transporte reativo para simular a formação de cavidades por dissolução da rocha em reservatórios naturalmente fraturados. Empregou-se o código in house em elementos finitos CODE\_BRIGHT (Olivella et al., 1994).

## 1.2 OBJETIVOS DO TRABALHO

Neste item será explicado os objetivos gerais e específicos deste estudo bem como a estrutura da dissertação.

### 1.2.1 Geral

Esta dissertação foi realizada com o objetivo de simular numericamente, empregando uma formulação de transporte reativo (acoplamento hidro geoquímico), a formação de cavidades (carste) em cenários sintéticos de rochas naturalmente fraturadas com foco na determinação da região e geometria de carstificação como função do arranjo de fraturas e regime de fluxo de fluido. Para as análises o tipo de rocha utilizado foi a gipsita e avaliou-se a variação de propriedades como concentração de mineral reativo, porosidade e permeabilidade, bem como a avaliação da variação da pressão de líquido na região carstificada. Dadas as análises objetivou-se realizar a verificação qualitativa dos resultados pela comparação com feições cársticas observadas em imagens de afloramentos análogos.

### 1.2.2 Específicos

Os objetivos específicos do presente trabalho foram:

- Simular a formação de carste epigênico;

- Simular a formação de carste hipogênico (isotérmico);
- Avaliar a influência do regime de fluxo e do arranjo da rede de fraturas;
- Simular um modelo de reservatório fraturado sintético com um dobramento, e analisar a influência do dobramento na geometria da cavidade.

### 1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação está organizada na seguinte sequência de temas:

Capítulo 2 - apresenta os principais temas para compreensão do problema estudado, como o conceito de carste, tipos e propriedades e os mecanismos conhecidos do transporte reativo.

Capítulo 3 - expõe a formulação numérica utilizada neste trabalho.

Capítulo 4 - são apresentados e discutidos os resultados de formação de carste através da simulação numérica.

Capítulo 5 - então as principais conclusões obtidas através da dissertação bem como sugestões para os trabalhos futuros. Em seguida seguem-se as referências utilizadas durante a pesquisa e redação da dissertação.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

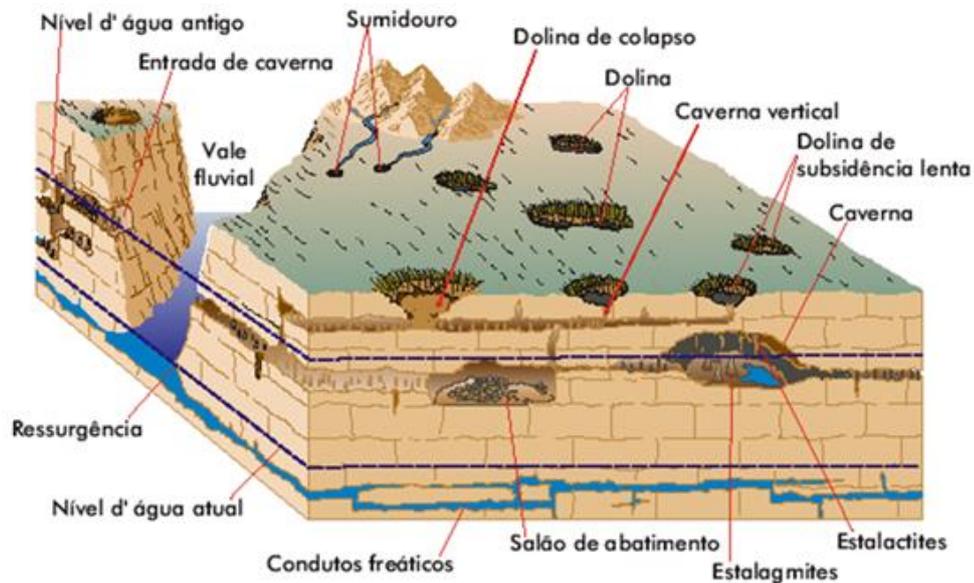
Neste capítulo será apresentado uma revisão da literatura de assuntos pertinentes ao desenvolvimento do estudo.

### 2.1 CARSTE.

O termo carste, foi definido pela primeira vez na região de Kras que se estende do norte da Itália até o sudoeste da Eslovênia e o noroeste da Croácia, incluindo ainda porções da Áustria e Croácia atuais. A palavra eslovena kras, deu origem nas línguas germânicas à palavra karst, nome pelo qual é conhecida a região, e nome que acabou definindo o tipo de relevo mundialmente (Hardt et al, 2009). A predominância do termo germânico sobre o termo de origem eslava ou italiana se explica pelo fato histórico de que, quando dos primeiros estudos científicos da região, está se encontrava sob o domínio do Império Austro-húngaro. Como resultado, as pesquisas iniciais foram publicadas em língua germânica, e por esta razão, o nome germânico predominou e é utilizado até hoje (Hardt et al., 2010).

Karst ou carste, é um tipo de feição geológica, também chamado de feição cárstico, caracterizado pela dissolução química das rochas por conta da percolação de algum fluido subsaturado de minerais reativos da formação no meio rochoso. Isto leva ao aparecimento de zonas de dissolução que podem acarretar no aparecimento de cavidades de porte maior e indicadores de colapsos de subsuperfície, como é possível observar na figura 1, tais como cavernas, dolinas, rios subterrâneos, etc. O carste pode ser visto como um sistema aberto composto de dois subsistemas hidrológicos e geoquímicos estreitamente integrados operando sobre as rochas solúveis (evaporitos, calcárias, carbonatos, etc.). As características do carste são os produtos da interação de processos nestes dois subsistemas ligados. Pode-se definir carste como terreno com hidrologia e formas de relevo que surgem de uma combinação de alta solubilidade em rocha e uma porosidade secundária (fratura) bem desenvolvida (Ford e Williams, 1989).

Figura 1: Componentes principais do sistema cárstico.



Fonte: Geocaching, 2016.

Segundo o trabalho realizado por Klimchouk e Ford (2000), o carst é definido como “*um sistema integrado de transferência de massa em rochas solúveis com estrutura de permeabilidade dominada por condutos dissolvidos da rocha e organizada para facilitar a circulação de fluidos*”. Expressando nessa definição que o carste pode ser formado tanto na superfície ou na subsuperfície.

Na geração destas paisagens, a rocha exerce uma influência marcante, pois propriedades petrográficas estão intimamente relacionadas à dissolução. Porém a solubilidade da rocha por si só é insuficiente para formação do carste. A estrutura, representada pelo arranjo das geometrias planares e lineares, é também fundamental, tendo em vista como guia inicial dos processos de dissolução. No domínio cárstico a porosidade encontra-se dividida em primária e secundária. A porosidade primária está relacionada à porosidade intergranular, formada na diagênese, não sendo de muita importância no carste, tendo em vista que os calcários, geralmente, apresentam-se de forma maciça, não permitindo uma circulação de água de forma eficiente através de seus grãos, mesmo assim é uma rocha bastante suscetível a formação de carste. Já a porosidade secundária é formada por juntas, falhas, fissuras e outras

estruturas (descontinuidades), sendo o tipo de porosidade mais importante relacionada ao processo (Piló, 2000).

Segundo White (1988), rochas solúveis com apenas porosidade primária, apresentando entre 30-50% de porosidade, geralmente apresenta pouco desenvolvimento de carste. Destaca-se ainda que rochas solúveis com porosidade primária insignificante, menos de 1%, que posteriormente desenvolveram uma grande porosidade secundária apresenta uma grande probabilidade de geração de carste. É necessário que o transporte de massa em solução seja mais importante que o transporte por outros processos. No entanto, tais mecanismo, no contexto da morfogênese, são marcados por descontinuidades, geralmente de difícil mensuração.

As fraturas ou juntas, que representam, descontinuidades sem um significativo deslocamento vertical ou lateral dos estratos, as forças tensional e de cisalhamento estão ligadas à sua origem. (Hasui e Mito, 1992). As fraturas são descontinuidades de grande importância na elaboração e desenvolvimento do carste. Mas para isso precisam ter uma abertura significativa para ocorrer a percolação do fluido reativo responsável do processo químico em questão.

Segundo Auler et al (1994) dobramentos em camadas de rochas carbonáticas podem criar diferentes estilos de carstes e variadas organizações hidrogeológicas. Forças tensionais tendem a criar um conjunto de juntas na crista dos anticlinais e nas depressões dos sinclinais, o que certamente potencializa os processos de dissolução neste tipo de estrutura. Auler et al (1994) destacou a importância dos eixos de dobras suaves na espeleogênese de alguns setores da maior caverna do Brasil, TOCA DA BOA VISTA (BA), com 85 km de desenvolvimento, assim como na configuração dos morros residuais que se destaca no relevo local. Eventos tectônicos particularmente aqueles que registram transporte horizontal, acarretando as lineações e estiramento. Na região de Lagoa Santa, as lineações participam da configuração de algumas Lapiás. Diante do exposto, é possível compreender a importância do controle litológico e estrutural na modelagem e também na própria existência da formação cárstica (Piló, 2000).

Segundo o trabalho desenvolvido por Piló (2000), a influência do clima na dinâmica e evolução do relevo cárstico têm sido alvo de debate nas últimas décadas. Corbel (1959) destacou os climas frios como os mais aptos à carstificações, pois a água fria tem maior

capacidade de absorver CO<sub>2</sub>. Por exemplo, a 20°C a solubilidade do CO<sub>2</sub> é a metade que a 0°C (Bögli, 1964). Por outro lado, Lehmann (1936) privilegiou os climas tropicais, por conta da maior quantidade de CO<sub>2</sub> disponível. Outro fator climático importante é a precipitação, a quantidade de água tem sido considerada como um fator climático principal para um melhor desenvolvimento do carste.

Existem três conjuntos morfológicos de formações cársticas, onde as formações superficiais são denominadas exocarste por Bögli (1980). White (1988) caracterizou vários tipos de carste, em função do arranjo morfológico de seus principais componentes: carste de dolinas, carste em torres, carste em pavimento etc. A dolinas podem ser consideradas a mais peculiar do exocarste, e apresentam forma de depressões fechadas circulares ou elíptica que se formam na superfície, em função da dissolução de rochas reativas, normalmente em subsuperfície. As dolinas podem atingir de poucos metros a centenas de metros de profundidade por várias centenas de metros de diâmetro.

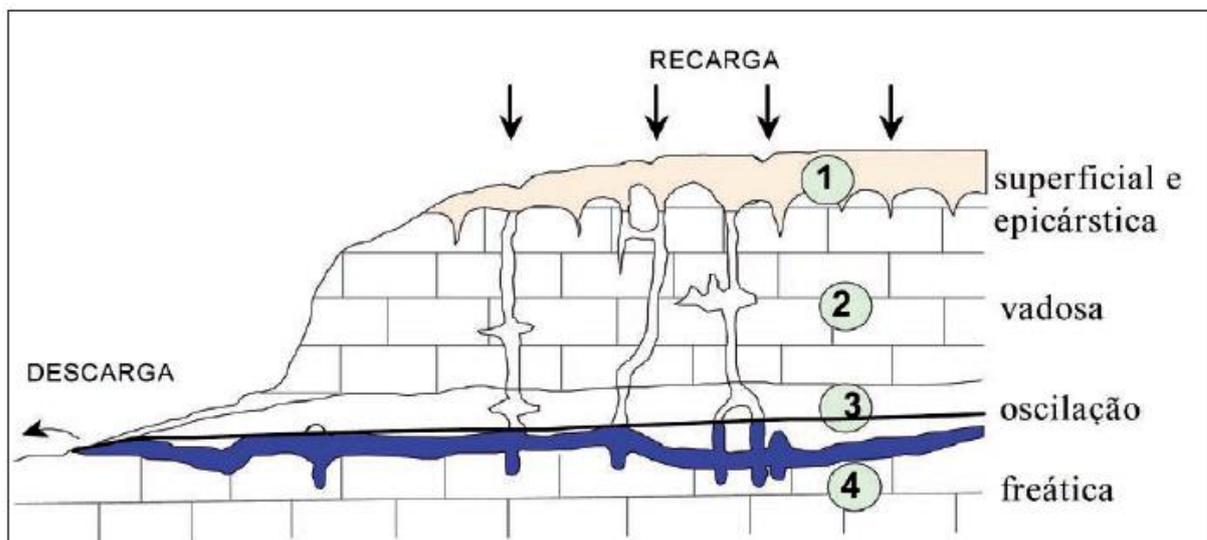
Relativo à classificação, as dolinas são divididas em quatro tipos: dolinas de dissolução, dolinas de colapso ou abatimento, dolina de colapso devido ao carste subjacente e dolinas aluviais ou de subsidência (Jennings, 1985). As duas primeiras se formam quando ocorre maior dissolução em pontos mais suscetíveis da rocha, como fraturas e juntas, formando pequenas depressões. Em seguida as águas superficiais convergem para essa região acelerando o processo de dissolução. A dolina de colapso ou abatimento é formada principalmente pelo desmoronamento do teto ou parede das cavernas. Essas feições são caracterizadas pela maior dissolução da zona epicárstica, contato solo-rocha, ou endocarste. As dolinas aluviais ou de subsidência ocorrem quando existe espessas coberturas de solo ou outro material móvel cobrindo a rocha, sendo gradualmente introduzido nas fraturas da zona epicárstica, o que acarreta pequenas subsidências formando com isso dolinas.

O conjunto morfológico da epicarste, ou zona subcutânea, é constituída pela porção superior da rocha subjacente coberta por material inconsolidado ou não, contendo uma rede de fissuras alargadas por processos cársticos (Williams, 1985). O solo assume um papel importante na análise da zona epicárstica. Pois esses materiais encontram-se em contato direto com a rocha solúvel subjacente, influenciando a circulação hídrica interna e a elaboração da morfologia rochosa coberta, como também a exocarste e o endocarste.

O termo endocarste foi utilizado para designar a zona do carste, onde se inclui os condutos subterrâneos e seus depósitos químicos, clásticos e orgânico (carste subterrâneo) segundo Bögli (1980). O fator principal da gênese das cavernas está condicionado à atitude estrutural da rocha (geometrias planares e lineares e inter-conecções) e sua relação geográfica entre área de recarga e de descarga hídrica.

Existe uma longa discussão sobre o regime hidrológico mais propício para a formação de cavernas e a existência ou não de um nível de base no carste vem marcando os estudos da formação de cavernas nas últimas décadas. Sabe-se hoje que as cavernas são formadas tanto na zona vadosa do solo como na zona freática ou mesmo no nível freático (White, 1988), como ilustrado na figura 2 onde é apresentado quatro zonas hidrológicas no carste, zona superficial e epicárstica, onde a água escoia superficialmente ou percola pelo solo ou fissuras, zona vadosa, onde a água circula livremente pelos condutos, sob ação da gravidade, zona de oscilação do nível freático, onde os condutos apresentam-se alternadamente saturados e secos e a zona freática onde os condutos estão totalmente ocupados por água.

Figura 2 - formação de carste em sistemas hidrológicos diferentes.



Fonte: Instituto Chico Mendes, 2013.

É possível classificar as cavernas de acordo com o tipo de fluxo ocorrido em cavernas epigênicas e hipogênicas. Nas cavernas epigênicas a água se infiltra no meio rochoso a partir do exterior. A maneira como está infiltração se dá será importante na definição do padrão das galerias. Em locais onde a infiltração é pontual, como por exemplo em um sumidouro ou em

fundo de dolina, a tendência será a formação de uma caverna do tipo ramiforme dendrítica. No caso de uma infiltração difusa, como em uma zona de inundação, cavernas labirínticas do tipo reticulado pode se formar (Auler, 1994).

Já em uma caverna hipogênica, o fluxo com o agente ativo na dissolução é proveniente de subsuperfície (Klimchouká et al, 2000). Ford e Williams (1989) e Worthington e Ford (1995) definiram cavernas hipogênicas como aquelas formadas por águas hidrotermais ou por águas contendo sulfeto de hidrogênio. Hill (2000) restringiu a noção de carste e espeleogênese hipogênica a processos e formas relacionados ao H<sub>2</sub>S. Palmer (1991) definiu cavernas hipogênicas de forma mais ampla, como aquelas formadas por ácidos de origem profundamente arraigada, ou ácidos epigenéticos. Posteriormente, Palmer (2000) apresentou a definição de forma ligeiramente modificada e ainda mais ampla: cavernas hipogênicas são formadas por água na qual a agressividade foi produzida em profundidade abaixo da superfície, independente da superfície ou do CO<sub>2</sub> do solo ou outras fontes de ácido próximas à superfície. Essa modificação é importante, pois formalmente nos permite incluir na classe de características formadas por fontes de agressividade independentes da superfície, mas não ácidas (como a agressividade da água em relação aos evaporitos).

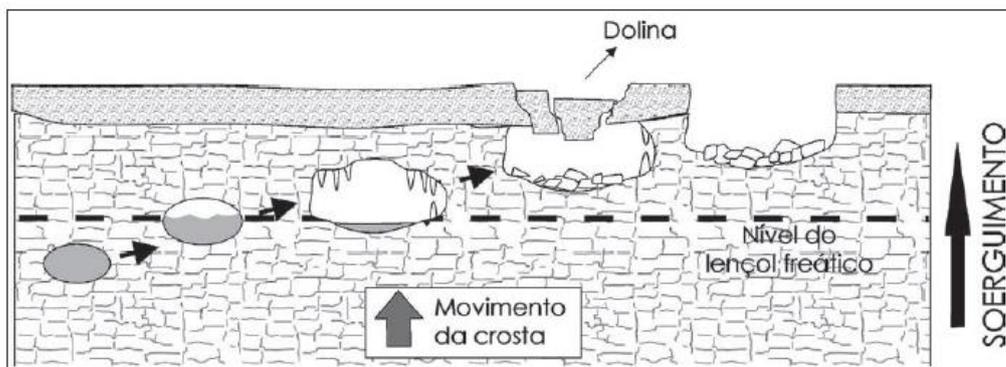
Segundo Palmer (2000), a agressividade é um atributo transitório da água, que pode ser liberado da profundidade ou adquirido dentro de uma dada formação solúvel (devido a processos de mistura ou redox, por exemplo). Sugere-se aqui que a definição de espeleogênese hipogênica deve, antes, referir-se à fonte de água subterrânea, pois é um meio de transporte de matéria aquosa e não aquosa e energia, um agente reativo e um componente principal do ambiente espeleogênico. A espeleogênese hipogênica é definida aqui, seguindo a recente sugestão de Ford (2006), como “a formação de cavernas por água que recarrega a formação solúvel a partir de baixo, impulsionada pela pressão hidrostática ou outras fontes de energia, independente da recarga do recobrimento ou imediatamente superfície adjacente.

O ácido sulfúrico é o principal agente na gênese de muitas cavernas hipogênicas. Podendo ser produzido a partir do gás H<sub>2</sub>S que ascende pela rocha e se mistura com a água subterrânea produzindo o ácido sulfúrico que dissolve a caverna. A origem do H<sub>2</sub>S pode estar ligada a bacias de hidrocarbonetos (petróleo), como no caso das enormes cavernas de Lechuguilla e Carlsbad nos Estados Unidos. Este parece ser o agente principal responsável em

maior ou menor grau pela gênese de diversas cavernas em litologias do Grupo Una, centro Norte da Bahia, como a Toca da Boa Vista (Auler et al. 2003).

Cavernas hipogênicas diferem em alguns aspectos importantes de suas correspondentes epigênicas. Como foram criadas a partir do interior da rocha, não possuem qualquer relação com o terreno superficial. Suas entradas são normalmente abatimentos que são gerados devido à interceptação de condutos preexistentes ou por rebaixamento natural da superfície. Cavernas hipogênicas não possuem necessariamente entradas, e, portanto, sendo formações difíceis de ser identificadas, necessitando na maioria dos casos sondagens indiretas para serem identificadas, dando a falsa impressão de que representam uma tipologia rara no contexto espeleológico. Algumas deste tipo de caverna, ao final da evolução, acaba se tornando superficiais por conta do soerguimento e erosão superficial (desnudação), como é possível visualizar na figura 3. De saturadas acabam se tornando secas e por fim pode até acarretar a formação de dolina de colapso (figura 4).

Figura 3 - etapas da formação da caverna hipogênica.



Fonte: Instituto Chico Mendes, 2013.

Figura 4 - Dolina de colapso



Fonte: diak / Shutterstock.com

Em termos de química, é necessário que a água mantenha sua capacidade de dissolução dos minerais ao longo de todo o percurso. A medida que ela dissolve o carbonato por exemplo, a água vai se tornando saturada de mineral solúvel, diminuindo assim a capacidade de alargar o conduto. No entanto, essa diminuição se dá de forma bastante lenta, tornando possível que longos condutos sejam alargados. Worthington & Ford (1995) discutiram que além do ácido carbônico, o ácido sulfúrico, ainda que em pequenas quantidades, pode ser importante na iniciação de condutos.

Há um reconhecimento crescente de que a carstificação hipogênica, formada sob condições confinadas e profundas pelo aumento do fluxo de fluidos, pode gerar poros macro e mega (escala de metros). Embora esse tipo de processo cárstico tenha o potencial de criar cavernas extensas, também tem o potencial gerar características abaixo da resolução sísmica, justificando, assim, o uso de estudos analógicos. Nesta linha de estudo destaca-se o trabalho realizado por Ennes et al. (2015) que utilizou o principal sistema de cavernas hipogênica da América do Sul, Formação Salitre. Utilizada como análogo de formações do pré-sal no Brasil, fazendo a análise da dissolução de fraturas subverticais desenvolvidas principalmente ao longo das charueira anticlinal. Essas seguem a tendência geral de deformação regional, que também é previsível. Com o intuito desvendar a geometria e a origem do sistema das formações hipogênicas para entender as propriedades de permeabilidade e da porosidade do reservatório. Este estudo destaca a importância da determinação da origem dos sistemas cársticos para a compreensão de reservatórios carbonáticos fraturados e carstificados altamente heterogêneos.

Segundo o trabalho de Melo (2012), além de processos naturais a intervenção humana, pode ocasionar a formação de carste, gerado como consequência de atividades como por exemplo a produção em reservatórios de petróleo ou pelo armazenamento geológico de dióxido de carbono, que se tornou a forma mais interessante na redução das emissões de gases de efeito estufa, em reservatórios de petróleo depletado os quais tem grande capacidade de armazenamento, Entretanto a injeção, em larga escala de fluidos reativos líquidos ou gasosos, assim como CO<sub>2</sub>, em reservatório pode ocasionar o acontecimento de dissolução química, precipitação além de outras reações. Dependendo da composição e distribuição dos minerais das rochas, as interações rocha-fluido reativas podem ter um impacto significativo na estrutura da matriz porosa.

Segundo o trabalho realizado por Klimchouk (2007), as feições cársticas formam algumas paisagens consideradas bastantes impressionantes ao redor do mundo, mas são também um grande desafio em termo de problemas de água subterrânea e de engenharia. Como tópicos relacionados a produção em poços de petróleo, por exemplo, envolve muita incerteza pois a natureza da porosidade e permeabilidade das rochas solúveis não são facilmente previstas. Muitos depósitos importantes de hidrocarbonetos em todo o mundo estão associados a formações carstificadas. Uma questão importante na exploração de hidrocarbonetos é a caracterização da porosidade cárstica em horizontes de produção em campos de petróleo e gás. Atualmente é abordado quase exclusivamente com base em conceitos cársticos epigenicos gerais. No trabalho de Klimchouk (2007) foi mostrado o conceito de espeleogênese hipogênica que abre novas perspectivas para interpretar características cársticas em campos de petróleo e gás e aplicar o conhecimento cárstico e espeleogênico às necessidades da indústria.

## 2.2 HIDROGEOQUÍMICA.

A geoquímica das águas subterrâneas, também chamada de hidrogeoquímica, é uma ciência que relaciona a composição química da água aos processos e reações no ambiente de subsuperfície. O enfoque principal da hidrogeoquímica é a compreensão da origem e evolução química dos constituintes presentes na água, em decorrência dos processos físico-químico-biogeocímicos que acontecem durante o fluxo da água subterrânea nos aquíferos, desde a zona de recarga até os exutórios naturais. A composição da água subterrânea é função

rocha, através da qual ela percola, e da interação entre água, minerais, gases e microorganismos. (MESTRINHO, 2008).

Segundo Mestrinho (2006), os principais processos naturais que ocorrem nas zonas saturadas e não saturadas do subsolo e que determinam o tipo e a quantidade de constituintes presentes na água são a dissolução de gases, reação ácido-base, sorção e troca iônica, dissolução/precipitação de minerais, oxidação-redução e os processos biológicos ou reações de biotransformação. A entendimento desses processos permite uma melhor interpretação da interação água/rocha. Adicionalmente, à parte dos fatores naturais, os efeitos da poluição, também, devem ser considerados.

A modelagem hidrogeoquímica é baseada nas leis químicas e termodinâmicas, que são independentes do ambiente geológico, e, acoplada ao fluxo de água, é uma ferramenta necessária para se conhecer as características quantitativas e qualitativas dos principais processos mencionados anteriormente, que controlam a qualidade da água subterrânea. É um método que permite a representação matemática da hidrogeoquímica e requer o uso de programas de computação adequados, como o PHREEQC (PARKHURST e APPELO, 1999).

Para modelar os processos hidrogeoquímicos, exige-se uma análise detalhada e precisa da água, bem como a entrada de dados termodinâmicos e cinéticos. Dados termodinâmicos, tais como produtos de solubilidade e constantes de formação de complexos, muitas vezes são fornecidos como bases de dados dos respectivos programas (MERKEL e FRIEDRICH, 2008).

### 2.3 TRANSPORTE REATIVO.

De acordo com os processos físicos ocorridos no processo do transporte reativo. Existe o trabalho de Henry Darcy, que deu origem a lei de Darcy, publicando o resultado de suas pesquisas em 1856 (ROCHA e CRUZ, 2001), o qual investigou o fluxo de água através de camadas de areia, com esse estudo ele verificou que o escoamento de água através de uma coluna de areia saturada é proporcional à diferença de pressão hidráulica nos extremos da coluna e inversamente proporcional ao comprimento da coluna. Sendo utilizado como princípio básico do fluxo da água subterrânea, expressa matematicamente pela fórmula:

$$v = \rho \frac{\Delta h}{\Delta x d} \quad (2.1)$$

Onde  $v$  é a velocidade de escoamento;  $\Delta h$  é a diferença das cargas hidráulicas,  $d$  é a distância entre os pontos onde a diferença de pressão foi medida e  $\rho$  é uma constante que depende das características do material poroso onde ocorre o fluxo de água (ROCHA e CRUZ, 2001).

O soluto é a substância que se encontra dispersa no solvente. Corresponde a substância que será dissolvida. Geralmente, apresenta-se em menor quantidade na solução. Solvente é a substância na qual o soluto será dissolvido para formação de um novo produto. Apresenta-se em maior quantidade na solução.

O primeiro trabalho referente a advecção foi o de Fetter (1993) no qual define como o mecanismo de transporte responsável pela migração do soluto devido ao fluxo do fluido intersticial no qual ele está dissolvido, sem que haja movimento relativo entre as partículas do soluto e da solução aquosa. A quantidade de contaminantes que está sendo transportada é função da concentração de solutos dissolvidos e da quantidade de fluxo do solvente. O fluxo advectivo é simplesmente a velocidade de fluido vezes a concentração do soluto. A concentração de soluto em um ponto de amostragem é a mesma do ponto de lançamento do contaminante. O transporte advectivo unidimensional é dado por;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.2)$$

$$V_x = \frac{k}{n} \cdot i \quad (2.3)$$

Onde  $C$  é a concentração da massa do soluto na solução,  $V_x$  a velocidade intersticial do fluido,  $k$  o coeficiente de permeabilidade,  $n$  a porosidade e  $i$  o gradiente hidráulico.

Por conta do gradiente de concentração que existe em um fluido, ocorre o transporte de contaminantes por difusão molecular ou simplesmente difusão, também chamado de movimento browniano, ou seja, o soluto dissolvido na água (solvente) desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, visando equalizar a concentração em toda massa de fluido. Este fenômeno ocorre independente da velocidade do fluido, mas é acentuado pela turbulência resultante do mecanismo de mistura mecânica. A difusão do soluto é proporcional ao gradiente de concentração, a qual pode ser expressa pela primeira lei de Fick (Elbachá, 1989).

$$F = -D_o \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.4)$$

Onde  $F$  é o fluxo difusivo de massa,  $Do$  é o coeficiente de difusão e  $\partial C / \partial x$  é o gradiente de concentração.

O sinal negativo indica que o movimento ocorre das áreas de maior concentração para o de menor concentração. Para sistemas onde a concentração varia com o tempo, aplica-se a segunda lei de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = Do \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} \quad (2.5)$$

Em um meio poroso, especialmente os de granulometria fina, a difusão é consideravelmente menor do que na solução livre. Isto acontece por conta da tortuosidade das trajetórias de fluxo, pequeno volume de fluido para o fluxo e a retenção de íons e moléculas nas superfícies das partículas (Mitchell, 1991). Sendo assim, deve-se usar um coeficiente de difusão efetiva como apresentado a seguir na equação 2.6:

$$D' = \omega \cdot \phi \cdot Do \quad (2.6)$$

Onde  $\omega$  é o coeficiente de tortuosidade que é adimensional (Bear, 1972),  $\phi$  é a porosidade.

Como o fluxo no meio sólido ocorre em canais individuais, acarreta no desenvolvimento de velocidades médias diferentes em canais diferentes, devidas à variação das dimensões dos poros ao longo das linhas de fluxo e do desvio da trajetória das partículas em decorrência da tortuosidade, reentrâncias e interligações entre os canais. Por conta desses fatores ocorre a mistura mecânica (Bear, 1972).

Quando a dispersão ocorre na direção do fluxo é chamada de dispersão longitudinal e quando ocorre em direção perpendicular ao fluxo é chamada de dispersão transversal. Assumindo que a dispersão pode ser descrita pela lei de Fick para difusão e que a quantidade de mistura mecânica é função da velocidade linear média, pode-se introduzir um coeficiente de dispersão mecânica, conforme apresentado a seguir (Elbachá, 1989);

$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica longitudinal} = \alpha_L Vx \quad (2.7)$$

$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica transversal} = \alpha_T Vx \quad (2.8)$$

Onde  $\alpha_L$  é o coeficiente de dispersividade longitudinal e  $\alpha_T$  é o coeficiente de dispersividade transversal.

O processo de difusão molecular não pode ser separado da dispersão mecânica no fluxo de líquidos em meios porosos. Esses dois processos são combinados para definir um parâmetro chamado coeficiente de dispersão hidrodinâmica,  $D_H$  apresentado a seguir:

$$D_{HL} = \alpha_L V_x + D' \quad (2.9)$$

$$D_{HT} = \alpha_T V_y + D' \quad (2.10)$$

Onde as equações 2.9 e 2.10 representam respectivamente o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal e o coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal.

A Teoria do transporte reativo tem seu desenvolvimento contínuo e progressivo em termos de teorias e formulações que, cada vez mais, tendem a levar em considerações as condições reais do meio em estudo. Um importante trabalho desenvolvido que combina a formulação já existente acoplada termo-hidro-mecânica (Oliveilla et al, 1994) com as equações do transporte reativo, desenvolvendo a formulação termo-hidro-mecânica e geoquímica (THMG), de uma maneira totalmente acoplada foi o de Guimarães (2002). O qual apresenta que na formulação do transporte reativo de várias espécies químicas, unidades composicionais formadas por átomos ou moléculas usadas para definir um sistema químico, através do meio poroso, que reagem entre si numa mesma fase líquida (reações homogêneas) e com outras espécies na fase sólida (reações heterogêneas). Onde os principais processos incorporados no modelo geoquímico são: formação de complexos aquosos, reações ácido/base, reações de oxidação e redução, dissolução/precipitação de minerais e troca-catiônica. Sendo considerado para todas reações a hipótese de equilíbrio local. Entretanto as reações de dissolução e precipitação de minerais também se admite a cinética.

As variáveis básicas das equações de transporte reativo são as concentrações totais, que incluem os minerais precipitados em equilíbrio local e para resolver o equilíbrio químico se utiliza um algoritmo baseado na minimização direta da energia livre de Gibbs. Nesta formulação é possível resolver as equações do problema de equilíbrio químico, que são algébricas, separadamente das equações do transporte reativo em derivadas parciais. A formulação foi implementada no programa de elementos finitos CODE-BRIGHT, que utiliza o método de Newton Raphson para resolver o sistema não-linear da discretização das equações de transporte reativo (Oliveilla, 2002).

Para estudar a influência das variáveis ambientais (geoquímicas) no comportamento mecânico e hidráulico das argilas expansivas, Oliveilla considerou a influência do transporte

reativo no comportamento THM do meio poroso. Para isso neste trabalho foi utilizada a formulação THMG (implementada no software CODE BRIGHT).

A formulação THMG acopla os fenômenos que ocorrem no meio poroso como por exemplo a evaporação-condensação, precipitação, formação de complexos aquosos, reação ácido/base e reações de oxidação e redução, dissolução/precipitação e trocas catiônicas entre outros. Na formulação proposta por Oliveilla considerasse que os minerais sólidos ocupam um determinado volume no meio poroso, quando um mineral é dissolvido o volume que ocupava antes é incorporado ao volume de vazios, aumentando a porosidade e possivelmente a permeabilidade do meio.

No trabalho desenvolvido por Lichtner (1985) foi feito um procedimento que a partir das equações do balanço de massa de cada uma das espécies presentes no meio, se obtém um conjunto de equações de transporte independentes utilizando as restrições provenientes das reações químicas reversíveis, equilíbrio local. Ele dividiu o conjunto de espécies presentes no meio em espécies primárias e secundárias.

É preciso dar uma atenção ao problema de dissolução/precipitação dos minerais em equilíbrio local. Neste tipo de problema os minerais precipitados podem aparecer ou desaparecer do sistema segundo condições locais. Mudando o grau de liberdade do sistema no tempo e no espaço (Guimarães, 2002). No trabalho de Rubin (1983) é demonstrado que isso se trata de um problema de condição de contorno móvel e para um sistema com um único mineral estabelece dos conjuntos de equações algébricas e equações diferencial em derivadas parciais, uma para zona que o mineral está presente e outra para zona que não existe mineral. Para um sistema multicomponente, Lichtner(1985) propôs um modelo que cada associação mineral espacialmente separadas define um conjunto de variáveis independentes. E este modelo adotando os minerais precipitados como espécies primarias, verifica que o sistema de equações de transporte se desacopla resultando em uma substancial redução no número de equações simultâneas. Em consequência, cada associação de mineral define um subdomínio com diferente número de equações para o problema de transporte reativo. Também neste assunto Saaltink et al (1998) propôs uma formulação que elimina de maneira eficiente as concentrações minerais das equações de transporte através simples manipulações algébricas destas equações. Desta eliminação com a discretização da equação do transporte reativo é possível utilizar o método de Newton-Raphson para solução deste problema não linear de equações.

Na formulação THMG (Guimarães, 2002) o número de incógnita do problema de transporte reativo não depende localmente do número de minerais precipitados, sendo igual em todo o domínio. Então se utiliza como incógnita das equações de transporte as concentrações totais em lugar das concentrações aquosas. Com isto as concentrações dos minerais participam do problema de equilíbrio químico, que se resolve considerando a própria definição de concentração total como equação de balanço de massa local. Esta formulação é modular tanto pode resolver o problema do equilíbrio químico (equações algébricas) como do transporte reativo (Equações diferenciais em derivadas parciais) separadamente. Também é flexível pois permite resolver o equilíbrio químico por algoritmos diferentes tanto pelos baseados na direta diminuição de energia livre de Gibbs (Havie et al., 1987) como pelo baseado nas leis de ação de massas (Reed, 1982).

### **3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA**

A injeção em larga escala de fluidos reativos líquidos ou gasosos em reservatórios de petróleo pode induzir a uma complexa interação de fluxo multifásico, difusão, convecção, dissolução, precipitação e outras reações químicas. Estas interações rocha-fluido reativos podem ter um impacto significativo na estrutura da rocha.

O problema de transporte reativo consiste no transporte de várias espécies químicas através do meio poroso, que reagem entre si. As reações químicas podem ser homogêneas (entre as espécies aquosas) e heterogêneas (entre as espécies aquosas e sólidas) resultando na precipitação de novos minerais, dissolução de minerais já existentes ou ainda a conversão em outros minerais. Enquanto a dissolução aumenta a porosidade e a permeabilidade, os efeitos de precipitação são menos compreendidos. A precipitação pode ocorrer uniformemente nas superfícies de grãos, diminuindo o volume do poro, e/ou entre os grãos, bloqueando as gargantas dos poros (Melo, 2012).

Desta maneira, para a modelagem acoplada hidro-química dos casos apresentados neste trabalho, utilizou-se uma formulação de transporte reativo. A partir da equação de balanço de massa de cada uma das espécies presentes no meio, as equações finais de transporte independentes são obtidas usando as restrições provenientes das diversas reações químicas reversíveis (suposição de equilíbrio químico).

O problema hidráulico para fluxo monofásico tem como equação fundamental o balanço de massa da fase líquida, representado por:

$$\frac{\partial(\phi\rho_l)}{\partial t} + \nabla(\rho_l q_l) + f_l = 0 \quad (3.01)$$

Onde  $\rho_l$  é a densidade da fase fluida,  $\phi$  é a porosidade,  $q_l$  é o vetor de fluxo de Darcy, e  $f_l$  um termo de massa de fonte/sumidouro da fase fluida.

O fluxo  $q_l$  por sua vez vem dado pela lei de Darcy generalizada:

$$q_l = \frac{K}{\mu_f} (\nabla p_l + \rho_l g) \quad (3.02)$$

Onde  $K$  é o tensor de permeabilidade intrínseca,  $\mu_f$  é a viscosidade da fase e  $g$  o vetor de gravidade.

Considerando-se o transporte reativo de  $N$  espécies químicas em um meio poroso deformável, saturado por duas fases, temos que o transporte de cada uma dessas espécies pode ser expresso por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S_i \rho_l c_i) + \nabla \cdot (j_i) = R_i \quad (i = 1, \dots, N) \quad (3.04)$$

Onde  $\phi$  é a porosidade,  $S_i$  é o grau de saturação de líquido,  $\rho_l$  é a densidade do líquido,  $c_i$  é a concentração das  $i$  espécies em moles/Kg de solução e  $R_i$  é a taxa de produção total de  $i$  espécies devido às reações químicas, em moles/m<sup>3</sup>/s. Já  $j_i$  é o fluxo total de espécies  $i$  expresso em moles/m<sup>2</sup>/s. Segundo Olivella et al, (1994), este fluxo é considerado como a soma dos fluxos advectivos e não-advectivos, sendo o primeiro a soma do movimento da fase líquida com relação a fase sólida (governado pela lei generalizada de Darcy (equação 3.2)) e da fase sólida com relação a configuração de referência. Já o fluxo não-advectivo é o produto da difusão molecular e dispersão mecânica. Por simplificação, assume-se aqui que o tensor de dispersão mecânica é o mesmo para todos os solutos.

Para que a Equação 3.04 seja válida para todas as espécies, incluindo aquelas na fase sólida, é conveniente escrever o fluxo total como:

$$\mathbf{j}_i = (\rho_l c_i \mathbf{q}_l + D_l \nabla \cdot c_i) + (\phi S_l \rho_l c_i \dot{\mathbf{u}}) \quad (3.05)$$

Onde  $\mathbf{q}_l$  é o fluxo de líquido (definido pela lei de Darcy),  $\dot{\mathbf{u}}$  é a velocidade da fase sólida e  $D_l$  é o tensor de dispersão hidrodinâmica, que inclui a dispersão mecânica e a dispersão molecular.

Foi utilizado o modelo de Darcy no estudo do fluxo nas cavidades por motivo de simplificação e por considerar que as cavidades em análise estão totalmente preenchidas, podendo assim ser utilizado este modelo.

O primeiro termo da Equação (3.05) corresponde ao fluxo advectivo que está relacionado com a movimentação da fase via fluxo de Darcy. O segundo termo, que envolve as dispersões mecânica e molecular, define o fluxo não-advectivo. O terceiro termo está relacionado com o fluxo advectivo causado pela deformação do meio poroso (Biot).

O tensor de dispersão hidrodinâmica é definido por:

$$D_l = (\phi \rho_l S_l \tau D_m^i I - \rho_l D_l^i) \quad (3.06)$$

Onde,  $\tau$  é a tortuosidade,  $D_m^i$  é coeficiente de difusão molecular,  $I$  é a matriz identidade e  $D_l^i$  é o tensor de dispersão mecânica. Quando se considera o tensor de dispersão hidrodinâmica igual para todos os solutos, implicitamente se considera que todos têm o mesmo coeficiente de difusão molecular na fase líquida. Uma consequência direta desta simplificação é que, se as reações químicas conservam carga elétrica, as equações de transporte reativo (Equação 3.1), também a conservam.

Introduzem-se as reações em equilíbrio local para obter o conjunto de concentrações independentes no sistema. Seja  $N_x$  o número de reações reversíveis e linearmente independentes de um sistema composto por  $N$  espécies, o número de componentes químicos

independentes será  $N_c = N - N_x$  (para mais detalhes ver os estudos de: Reed, 1982; Lichtner, 1985). Isto permite dividir o sistema em  $N_c$  espécies primárias e  $N_x$  espécies secundárias, de maneira que se possam escrever as espécies secundárias em função das primárias através das reações reversíveis, através da expressão a seguir:

$$A_i = \sum_{j=1}^{N_c} \nu_{ij} A_j \quad (i=1, \dots, N_x) \quad (3.07)$$

Onde  $A_i$  e  $A_j$  são, respectivamente, as fórmulas químicas das espécies primárias e secundárias e  $\nu_{ij}$  é o número de moles da espécie primária  $j$  em um mol da espécie secundária  $i$ . Deve-se ressaltar que a classificação das espécies químicas em primárias e secundárias não é única.

A notação geral para as reações químicas (Equação 3.07) permite a inclusão de processos químicos mais relevantes (por exemplo, hidrólise, formação de complexos, reações ácido/base, reações de oxidação/redução, dissolução/precipitação de minerais e troca catiônica) na formulação considerando tanto a hipótese de equilíbrio local quanto a cinética.

Portanto, usando as propriedades de reações reversíveis (Equação 3.07), é possível definir as equações de transporte reativo por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S_i \rho_l U_j) + \rho_l U a_j q_l + (D_l \nabla U a_j + \phi S_i \rho_l U_j \dot{u}) + R_j^{irrev} = 0 \quad (i=1, \dots, N_x) \quad (3.08)$$

Onde  $U_j$  é a concentração total analítica e  $U a_j$  é a concentração total aquosa das espécies primárias  $j$ , definidas pelas Equações 3.09 e 3.10, respectivamente:

$$U_j = C_j + \sum_{i=1}^{N_c} \nu_{ij} X_i \quad (i=1, \dots, N_c) \quad (3.09)$$

$$U a_j = \lambda_j C_j + \sum_{i=1}^{N_c} \nu_{ij} \lambda_i X_i \quad (i=1, \dots, N_c) \quad (3.10)$$

Onde  $C_j$  e  $X_i$  são as concentrações das espécies primárias e secundárias,  $\lambda_j$  e  $\lambda_i$  são as mobilidades das espécies primárias e secundárias, respectivamente.

Uma forma de se resolver este problema é substituir as Equações 3.09 e 3.10 na Equação 3.08, tomando como incógnitas as concentrações das espécies primárias  $C_j$  e secundárias  $X_i$ . Assim, resulta um sistema de  $N_c$  equações e  $N_c+N_x$  incógnitas. As  $N_x$  equações que faltam são proporcionadas pelo modelo de equilíbrio químico (por exemplo, através das leis de ação de massa).

Na formulação aqui adotada, considera-se como incógnitas das equações de transporte (Equação 3.08), as concentrações totais  $U_j$ . Considera-se que  $U_{aj}$  e  $r_m$  são funções não-lineares de  $U_j$ . A ligação entre as incógnitas  $U_j$  e as variáveis dependentes  $U_{aj}$  e  $r_m$  é o modelo de equilíbrio químico (Guimarães, 2002). Este tipo de incógnita tem a propriedade de não depender das reações de equilíbrio, onde a concentração total  $U_j$  varia com o tempo exclusivamente devido ao transporte e às reações químicas na cinética. Como consequência disso, as condições iniciais das equações de transporte são dadas em concentrações totais  $U_j$  e as condições de contorno em concentrações totais aquosas  $U_{aj}$ .

Maiores detalhes do modelo de equilíbrio químico encontram-se descritos no trabalho de Guimarães (2002).

No acoplamento hidro-químico, o efeito químico na porosidade é estabelecido pelas concentrações dos minerais reativos. Na sequência será apresentada o desenvolvimento desta da influência das concentrações de minerais reativos na porosidade.

Inicialmente é definido as variáveis mais adequadas para representar as concentrações dos minerais em meios porosos, que de acordo com a modelo fase sólida é composta pelo mineral inerte e por vários outros minerais que podem se dissolver e precipitar por cinética ou equilíbrio local (minerais reativos).

Para cada mineral têm-se as concentrações que vem do problema do transporte reativo  $c_i$  (em mol/kg de líquido) e seu volume molar  $\nu_i$  (em m<sup>3</sup> de mineral/mol). Será conveniente ter as concentrações dos minerais em m<sup>3</sup> de mineral/ m<sup>3</sup> de vazios:

$$\phi S_i \rho_i c_i \quad (i = \text{mineral reativo}) \quad (3.11)$$

E dessa maneira pode-se somar as concentrações desses minerais e obter as concentrações totais dos minerais reativos:

$$M_r = \sum_i \phi S_i \rho_i c_i \quad (i = \text{mineral reativo}) \quad (3.12)$$

Onde o  $M_r$  é a soma dos volumes de todos os minerais reativos (todos menos o inerte) pelo volume de vazios médios ( $M_r$ , m<sup>3</sup> de mineral reativo/m<sup>3</sup> de vazios). E o volume total de mineral no meio ( $M$ , m<sup>3</sup> /m<sup>3</sup> de vazios) é dado por:

$$M = M_r + M_I \quad (3.13)$$

Onde o  $M_I$  é o volume de mineral inerte pelo volume de vazios do meio.  $M$  está diretamente relacionado com a porosidade do meio poroso, já que:

$$\phi + M \phi = 1 \Rightarrow \phi = \frac{1}{1 + M} = \frac{1}{1 + M_r + M_I} \quad (3.14)$$

E com isso se estabelece uma relação muito simples entre as concentrações dos minerais e a porosidade.

Outra maneira de descrever está relação é:

$$\phi + M \phi = 1 \Rightarrow \phi + M_r \phi + M_I \phi = 1 \Rightarrow M_I \phi = 1 - \phi - M_r \phi \quad (3.15)$$

O problema do cálculo da porosidade em meios porosos reativos está, todavia indeterminado já que temos uma equação e duas incógnitas ( $\phi$  e  $M_I$ ). Para poder resolver este problema será utilizado a equação de conservação dos minerais inertes.

Neste caso primeiramente serão considerados os minerais incompressíveis. Desta maneira a conservação da massa e do volume é equivalente. A equação de conservação dos

minerais inertes são as mais adequadas para se obter as variações de porosidade para meios porosos reativos e deformáveis, pois estes minerais não dissolvem nem precipitam e, portanto, não existe termo fonte/sumidouro em sua equação de conservação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi M_I) + \nabla \cdot (\varphi M_I \dot{u}) = 0 \quad (3.16)$$

Considerando que  $M_I \cdot \phi = 1 - \phi - M_r \cdot \phi$ , e utilizando a derivada material, também chamada de derivada substancial é uma derivada tomada ao longo de um caminho movendo – se com velocidade, com relação à taxa de deslocamento da fase sólida ( $\dot{u}$ ) deduzindo equação final da variação da porosidade:

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \frac{-\varphi}{1+M_r} \frac{DM_r}{Dt} + \frac{1-\varphi(1+M_r)}{1+M_r} \nabla \cdot (\dot{u}) \quad (3.17)$$

Observa-se que quando não existem minerais reativos no meio poroso ( $M_r = 0$ ) a equação torna-se a equação clássica da variação da porosidade para meios deformáveis e não reativos (fase sólida incompressível):

$$M_r = 0 \Rightarrow \frac{D\varphi}{Dt} = (1-\varphi) \nabla \cdot (\dot{u}) \quad (3.18)$$

Por outro lado, quando  $\nabla \cdot (\dot{u}) = 0$  a equação da variação da porosidade para meios reativos indeformáveis é dada por:

$$\nabla \cdot (\dot{u}) = 0 \Rightarrow \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{-\varphi}{1+M_r} \frac{DM_r}{Dt} \quad (3.19)$$

Se agora o material poroso tiver uma porosidade  $\phi$  e uma determinada concentração de minerais reativos  $M_r$  e se impõe um fluxo onde todo este mineral se dissolve, a porosidade final (neste caso é  $\phi^{máx}$ ) é obtida integrando a equação acima:

$$\int_{\phi}^{\phi^{máx}} \frac{D\phi}{\phi} = -\int_{M_r}^0 \frac{DM_r}{1+M_r} \Rightarrow \frac{\phi^{máx}}{\phi} = 1+M_r \Rightarrow \phi = \frac{\phi^{máx}}{1+M_r} \quad (3.20)$$

Considerando que  $\phi^{máx}$  é um parâmetro do material (somente para o caso de meios indeformáveis), obtém-se  $M_i$  a partir de  $M_r$  :

A consistência matemática desta formulação pode ser verificada pela equação a seguir:

$$\phi = \frac{1}{1+M} = \frac{1}{1+M_r+M_i} = \frac{1}{1+M_r + \frac{(1+M_r)(1-\phi^{máx})}{\phi^{máx}}} = \frac{\phi^{máx}}{1+M_r} \quad (3.21)$$

No acoplamento hidro-químico as permeabilidades e porosidades da rocha são atualizadas em cada intervalo de tempo pelo módulo geoquímico (para problemas em meios porosos reativos) do programa CODE-BRIGHT.

Neste trabalho, utilizou-se uma relação exponencial entre a porosidade e a permeabilidade, implementada no programa de elementos finitos CODE-BRIGHT:

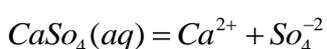
$$K = K_i \exp[b(\phi - \phi_i)] \quad (3.22)$$

Onde  $k_i$  é o tensor de permeabilidade inicial,  $\phi_i$  a porosidade inicial e b um parâmetro do material poroso.

## 4 RESULTADOS

Os resultados da modelagem numérica serão apresentados a seguir. Com o objetivo de modelar a dissolução da rocha naturalmente fraturada considerando a interação entre as fraturas verticais, sujeita ao fluxo de um fluido subsaturado de minerais da rocha, e horizontais associadas ao caráter sedimentar da formação rochosa, com o foco na carstificação da rocha nas zonas de cruzamento entre a fratura vertical e as fraturas horizontais e previsão da geometria destes carstes. Nas simulações dos problemas, a matriz rochosa é composta por uma rocha reativa seccionada por fraturas consideradas parcialmente abertas, tendo a finalidade de verificar o comportamento da dissolução da rocha reativa pelo fluxo de fluido subsaturado em um meio discreto. Neste estudo foram utilizados modelos simplificados bidimensionais, para minimizar o custo computacional, sendo possível o entendimento do fenômeno químico envolvido na formação das feições cársticas. As fraturas são tratadas numa abordagem de contínuo e com escoamento regido pela Lei de Darcy.

Para as simulações foi utilizada a gipsita como rocha reativa. A gipsita é, basicamente, composta por sulfato de cálcio hidratado. Apresenta geralmente coloração branca a translúcida. É o sulfato mais comum na crosta terrestre, ocorrendo em evaporitos ou na forma de camadas interestratificadas de folhelhos, calcário e argila. O sistema químico encontra-se descrito na equação 4.01:

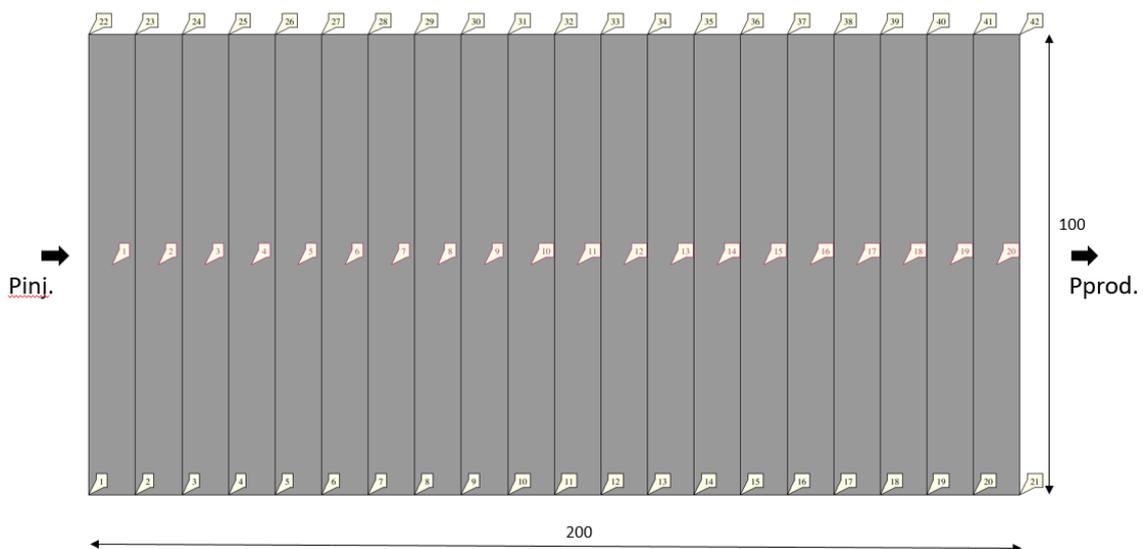


O pré-processamento das malhas em elementos finitos foram realizadas no software Gmsh e em seguida foi utilizado uma rotina em ambiente Matlab para impor a condições de contorno de fluxo, porosidade e as concentrações iniciais de material reativo nos nós de materiais compostos por gipsita. Para obtenção da constante de reação foi utilizada a base de dados Wateq. E em seguida foi utilizado o software CODE-BRIGHT para a simulação numérica hidro-química. De posse dos resultados foi utilizado o software GID para o pós-processamento.

#### 4.1 CASO 01: DISSOLUÇÃO DE ROCHA GIPSITA – MODELO 1D

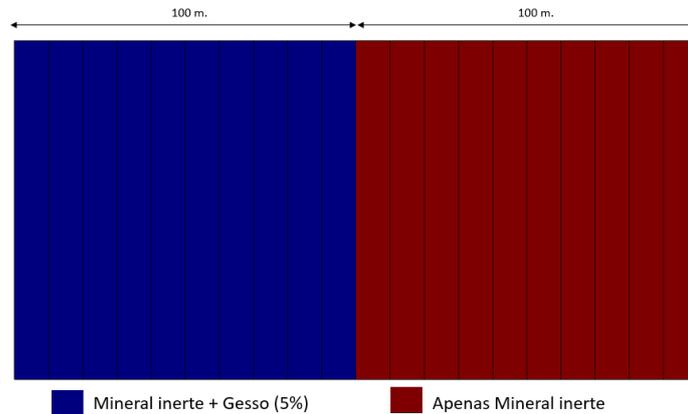
O cenário deste caso consistiu em realiza uma simulação usando uma formulação de transporte reativo, implementada no software Codebright, com finalidade de verificar a dissolução química de um bloco de rocha de gipsita, gerada pela injeção de água destilada subsaturada de minerais de gipsita, possuindo uma concentração inicial de 0.001 mol/kg e densidade de 1002,6 kg/m<sup>3</sup>. Com o intuito de verificar se a porosidade no final da análise coincide com o resultado real utilizado como calibrador. Com dimensões de 200 metros de largura e 100 metros de altura, com uma condição de contorno de pressão de entrada de 0 Mpa no lado esquerdo da geometria e -10 Mpa no lado direito (Figura 5), sendo o fluxo de água gerado por conta deste gradiente. A malha de elemento finitos, composta por 20 elementos retangulares e 42 nós. Nesta análise o mineral reativo se encontra do 1 até o 10 elemento e do elemento 11 ao 20 não existe concentração de mineral reativo (figura 6).

Figura 5. Caso 1 - características e malha em elementos finitos.



Fonte: O Autor

Figura 6. Caso 1 – Posicionamento dos materiais reativos e inerte.



Fonte: O Autor

Foi definida que a porosidade inicial da rocha reativa é igual  $\phi_0 = 0,20$  e da rocha não reativa  $\phi_f = 0,25$ . Com essa informação vai ser calculado o valor da concentração inicial do mineral reativo para que no final da dissolução a rocha que apresenta mineral reativo fique com uma porosidade final igual a rocha não reativa  $\phi_f = 0,25$  (figura 6).

$$Mr = \frac{\phi_f}{\phi_i} - 1 = \frac{0,25}{0,20} - 1 = 0,25 \text{ (m}^3 \text{ de gesso / m}^3 \text{ de vazios)} \quad (4.1)$$

Ou pelo volume do meio:

$$\phi_0 \cdot M_R = 0,20 \times 0,25 = 0,05 \text{ (m}^3 \text{ de gesso / m}^3 \text{ do meio)} \quad (4.2)$$

Com esse valor podemos calcular a concentração inicial de mineral reativo em  $\frac{mol}{kgw}$ ,

Onde a concentração é dada pela equação (4.3):

$$\phi_0 \cdot M_R = \phi_0 \cdot S_l \cdot d_l \cdot c_n \cdot V_n$$

$$c_n = \frac{\phi_0 \cdot M_R}{\phi_0 \cdot S_l \cdot d_l \cdot V_n} \rightarrow c_n = 3,338 \frac{mol}{kgl} \quad (4.3)$$

Onde

$c_n$  : Concentração de mineral reativo.

$\phi_0$  : Porosidade inicial.

$S_l = 1$  : Saturação.

$d_l = 1002,6 \frac{kg}{m^3}$  : Densidade da água.

$v_n = 74,69 \cdot 10^{-6}$  : Volume molar do gesso.

$M_R$  : volume de mineral reativo por volume de vazios.

Para realizar a simulação é inserido nos nós dos elementos que possuem mineral reativo a concentração inicial de material reativo que é dado pela equação 4.3.

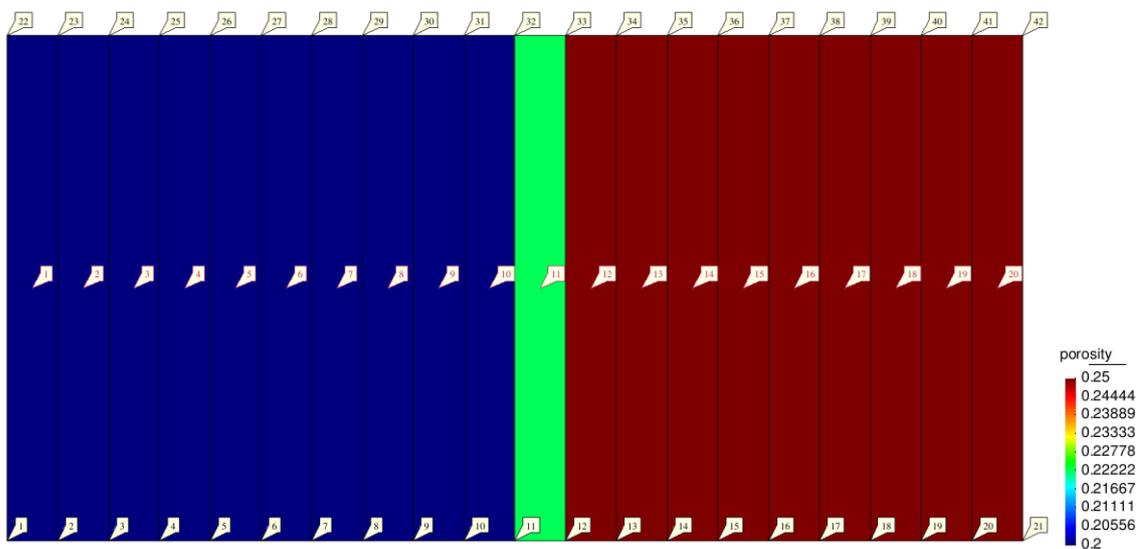
Para simulação o elemento 11 é o elemento de transição entre os elementos com porosidade 0,20 a esquerda do elemento e 0,25 a direita. Para calcular sua porosidade inicial utilizamos a formula a seguir.

$$\bar{M}_R = \frac{0,25}{2} = 0,125 \quad (4.4)$$

$$\phi_{11} = \frac{\phi_f}{1 + \bar{M}_R} = \frac{0,25}{1 + 0,125} = 0,222 \quad (4.5)$$

As porosidades iniciais podem ser vistas na figura 7.

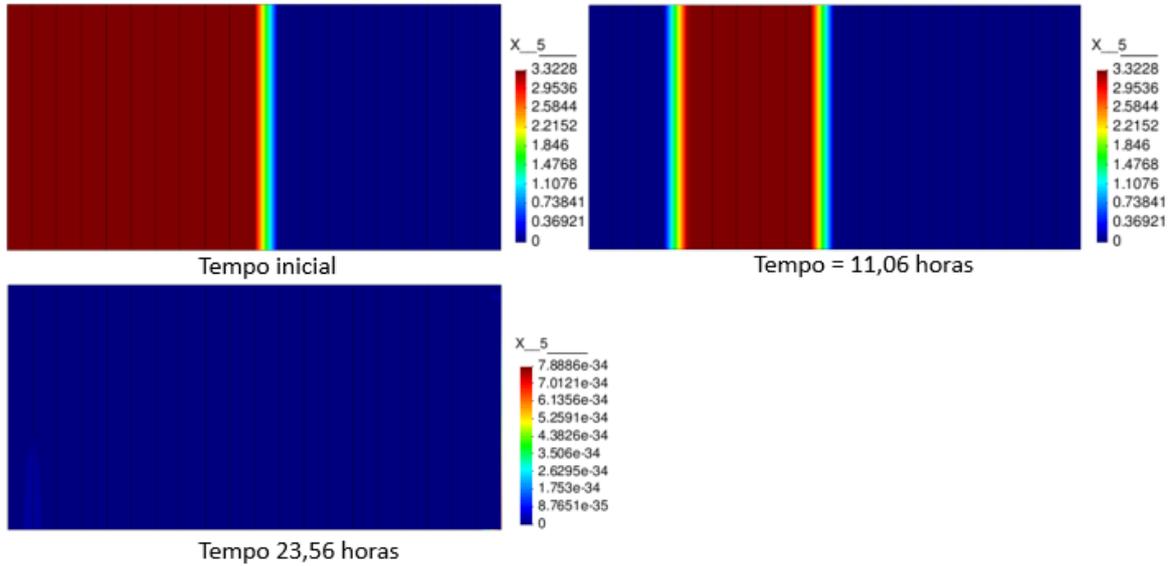
Figura 7: Caso1 – Condições iniciais de porosidade.



Fonte: O Autor

Na figura 8 podemos ver a evolução da dissolução do mineral gipsita com o passar do tempo (X5). É possível ver a total dissolução, nos elementos que possuem mineral reativo, chegando a concentração igual a zero. No tempo de 23,56 horas é possível observar uma precipitação de mineral na lateral direita da malha.

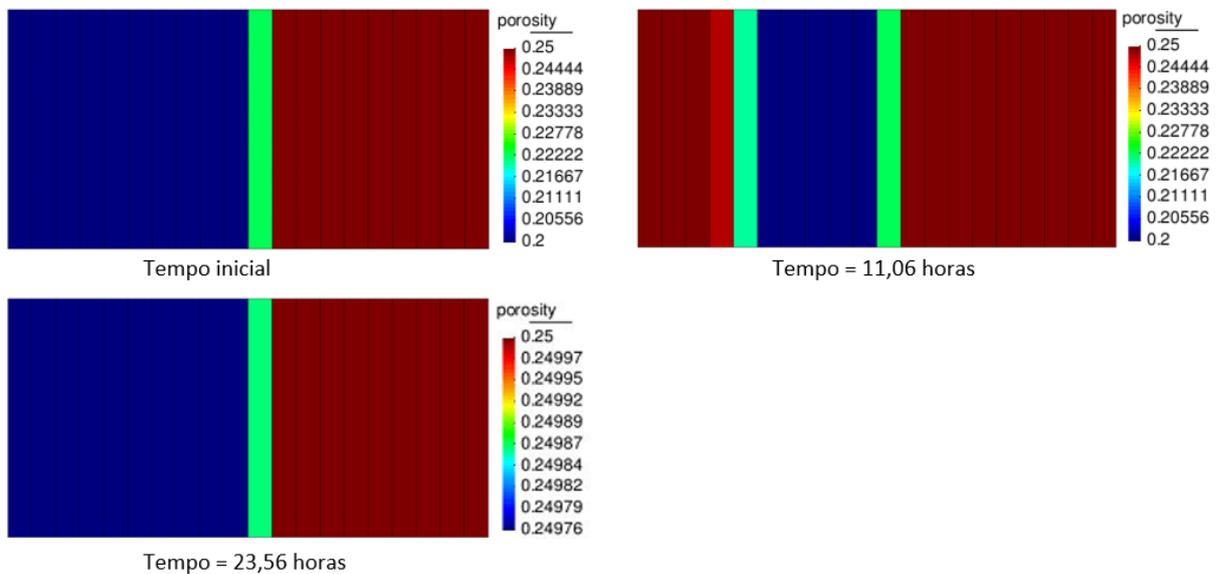
Figura 8. Caso 1 – Evolução da concentração de mineral reativo (X5).



Fonte: O Autor

Na figura 9 é possível ver a evolução da porosidade, com o passar do tempo, por conta do processo de dissolução.

Figura 9. Caso 1 – Evolução da porosidade para alguns espaços de tempo.



Fonte: O Autor

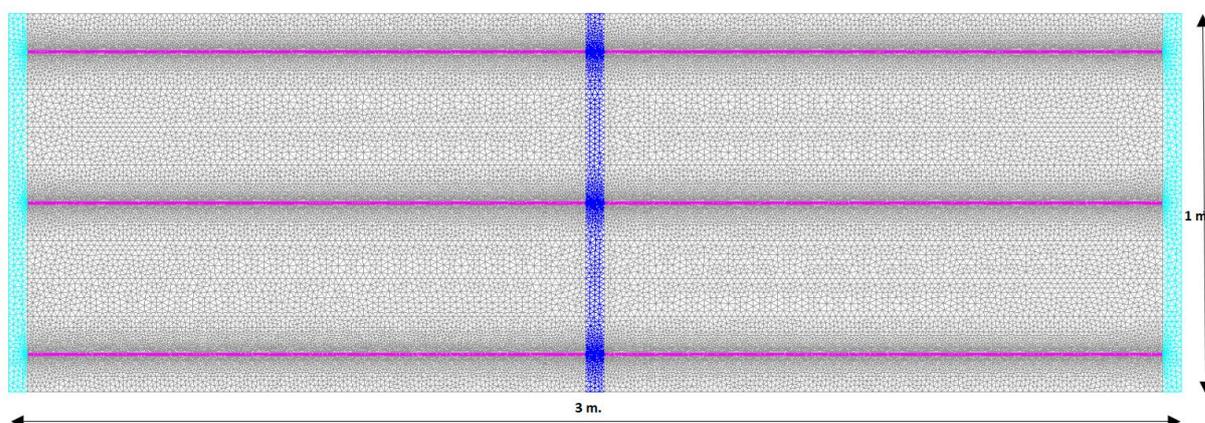
Pode-se verificar que com o fim da análise com 23,56 horas, as porosidades dos elementos reativos após a dissolução total apresentar a porosidade esperada que foi aproximadamente 0,25. Com isso foi verificado que a formulação do Code-bright funciona para o transporte reativo e depois deste caso 1D, foi possível passar a analisar casos mais complexos em 2D.

#### 4.2 CASO 02: SIMULAÇÃO DE CARSTE EPIGÊNICO

O cenário deste caso consiste em um modelo sintético, com geometria de malha mostrada na figura 10, com dimensões de 3 metros de comprimento por 1 metro de altura, possuindo fraturas verticais com abertura de 5 centímetros e horizontais com 1 centímetro. Com base neste modelo sintético foram realizadas simulações usando uma formulação de transporte reativo, com finalidade de verificar a dissolução química das rochas, acarretando a formação de cavidades por conta do processo de carstificação gerado pela injeção de um fluido subsaturado de minerais de gipsita. O fluido de injeção possui concentração inicial de 0.001 mol/kg e densidade de 1002,6 kg/m<sup>3</sup>. A concentração inicial do mineral da rocha foi de 100,8 mol/kgw, sendo a porosidade máxima  $\phi^{máx}$  de 0,6.

A malha, não estruturada, de elementos finitos é formada por 50151 nós e 99802 elementos tipo triangulo linear (figura 4).

Figura 10. Caso 2 - Modelo sintético de análogo de reservatório fraturado: características e malha em elementos finitos.



Fonte: O Autor

Como condição de contorno foi imposta a pressão de líquido de entrada de 4,8 Mpa, e uma de saída de 0,18 Mpa, representando o fluxo de fluido no meio fraturado devido a esse gradiente. Com o intuito de simular a formação carste epigênico, figura 11, foi prescrita uma entrada de água por meio de uma pressão de entrada no topo da fratura vertical central e o gradiente de pressão se dá pela pressão prescrita na base das fraturas verticais, sendo inferior à de entrada, indicando as regiões de saída de água. Não há fluxo nos contornos externos das fraturas laterais e nem na base e topo da rocha. Este cenário reproduz um fluxo de fluido do topo para a base da formação, na direção paralela ao plano da seção.

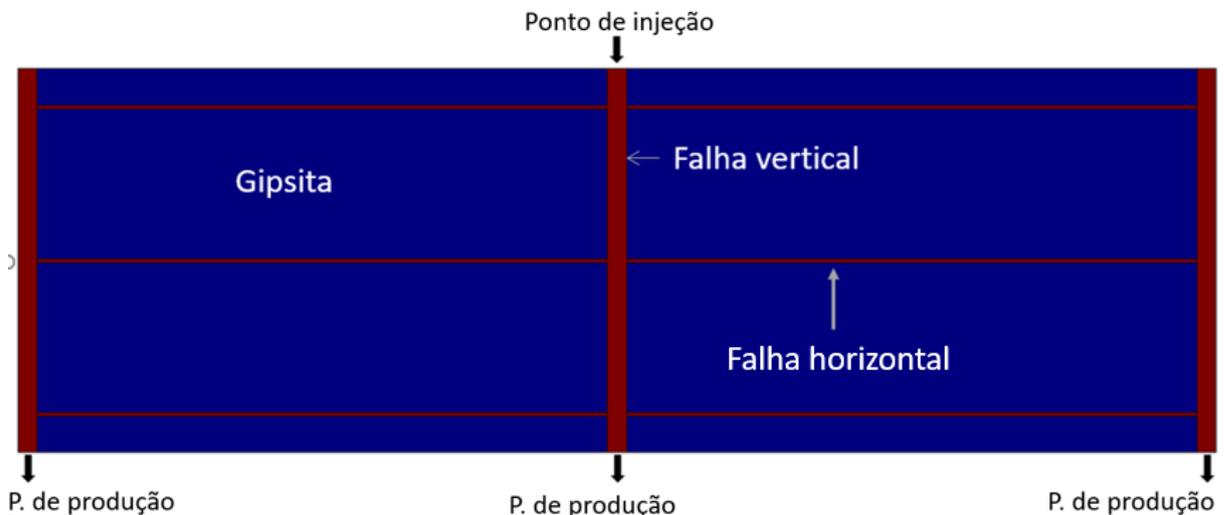
As propriedades dos materiais adotadas na simulação do caso estão descritas na tabela 1.

**Tabela 1: Propriedades das matérias empregadas no caso.**

Porosidade do material	Rocha intacta	Fraturas
Permeabilidade (m <sup>2</sup> )	$1.10^{-20}$	$1.10^{-11}$
Porosidade	0,10	0,6

Essas propriedades serão utilizadas para todos os casos subsequentes.

Figura 11. Caso2 - Condição de contorno de fluxo descendente no topo da fratura.

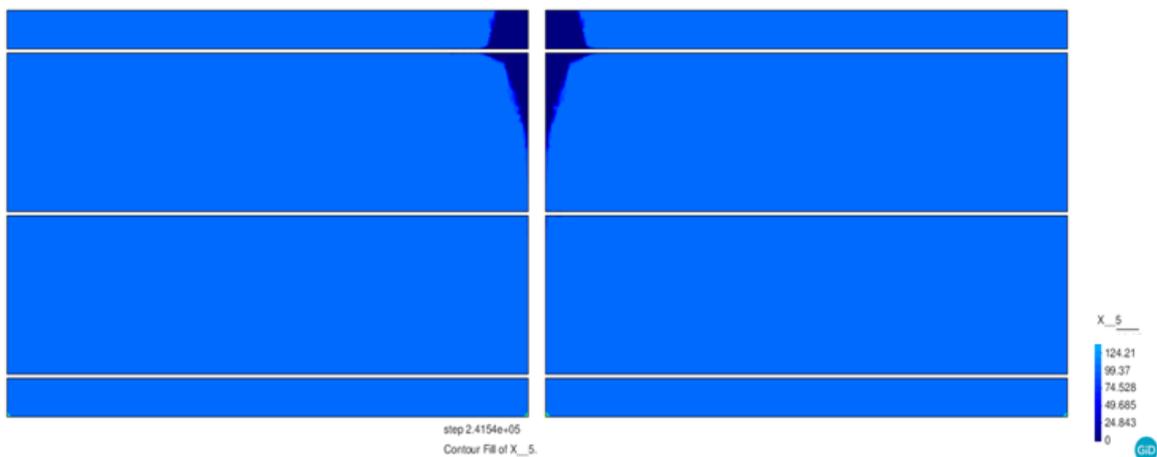


Fonte: O Autor

Como resultados da simulação numérica envolvendo a formulação de transporte reativo, consistindo em um acoplamento hidro-químico, foram avaliadas as variáveis de concentração total de minerais de gipsita ( $X_5$ ), a variação em porcentagem da porosidade em relação a inicial ( $\Delta\text{poro}$ ) e a variação do logaritmo da permeabilidade ( $\text{LogPerm}$ ). Além disso também são observados a pressão de líquido ao longo do processo de dissolução ( $Pl$ ), bem como os vetores de fluxo de fluido.

Por conta da dissolução da gipsita, é apresentado, na figura 12, a concentração do mineral ao final da simulação.

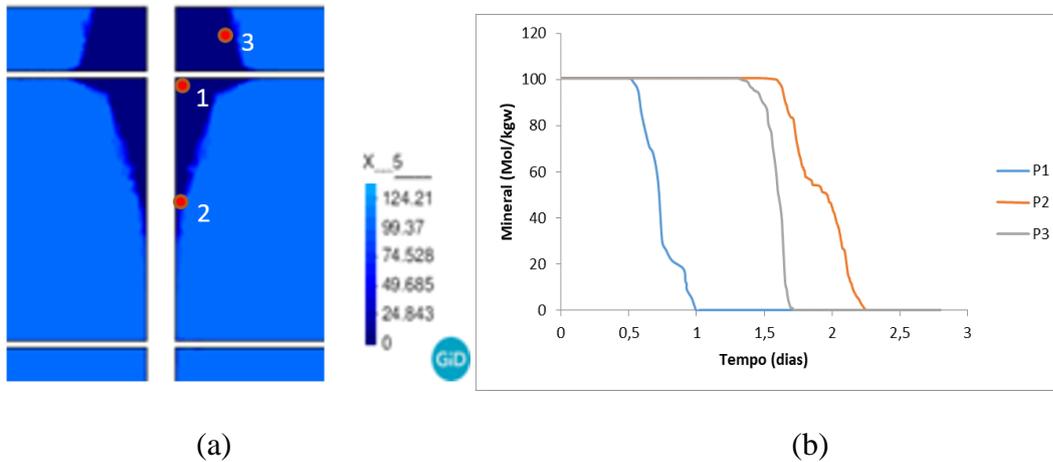
Figura 12. Caso 2 – fluxo descendente no topo da fratura vertical: Concentração total de minerais de gipsita ( $X_5$ ) após 3 dias.



Fonte: O Autor

Na figura 13 são apresentados os resultados do comportamento temporal da concentração do mineral no sentido do fluxo (eixo vertical) próximo na direção da dissolução da rocha (eixo horizontal), para isso foram selecionados três nós representados pelos pontos 1, 2 e 3 na figura 13(a). É possível verificar que o nó (1), que está localizado mais próximo ao cruzamento das fraturas apresenta uma dissolução mais rápida cerca de 1 dia. Já para o nó 3. A total dissolução aconteceu com 1,7 dia, porém de forma mais rápida que o ponto 2 por estar mais próximo do ponto de injeção. E por último o nó 2, com dissolução total acontecendo no tempo de 2,25 dias, uma vez que este se encontra mais afastado do encontro das fraturas e do ponto de entrada do fluido na fratura (ponto de injeção).

Figura 13. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: a) Concentração de mineral após 3 dias; b) evolução da concentração do mineral no sentido do fluxo e na direção normal a fratura principal.



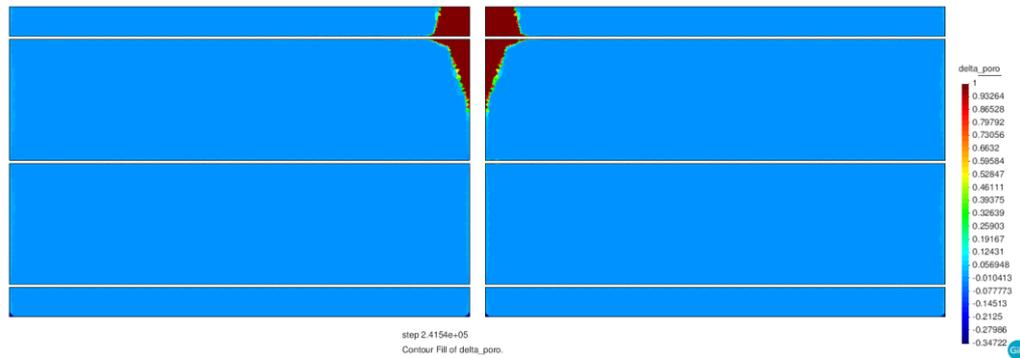
Fonte: O Autor

Este comportamento evidência a influência da interação entre fraturas, em seus cruzamentos, na direção de maior suscetibilidade à formação do carste. Nestas regiões o processo de difusão e cinética química se combinam com o fluxo de fluido mais intenso acelerando a dissolução da rocha em relação à observada ao longo das fraturas sem cruzamento.

À medida que a rocha é dissolvida, a concentração total de minerais solúveis fica igual a zero e a porosidade do meio aumenta, conforme visto na formulação apresentada no capítulo anterior. Isto pode ser observado na Figura 14 onde apresentam-se os resultados da variação da porosidade (*deltaporo*) em relação a inicial, à medida que o fluxo vai dissolvendo os minerais da gipsita, assim como a evolução temporal da porosidade nos nós analisados, figura 15.

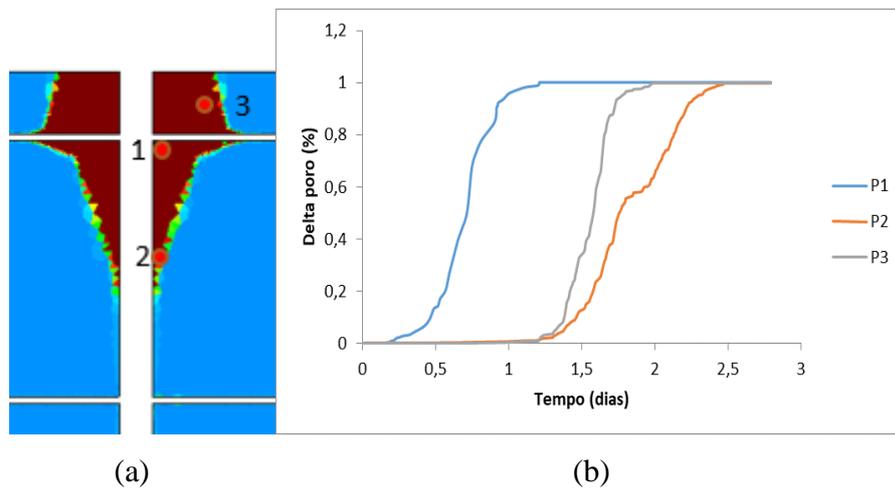
Como se pode observar, a porosidade é inversamente proporcional à concentração do mineral reativo, ou seja, quanto menor a concentração do mineral maior é o *deltaporo*, que significa uma maior dissolução da gipsita, obtendo o valor máximo de 1, quando o mineral é totalmente dissolvido. Este resultado evidência a formação de uma zona de carstificação ao longo da fratura, porém mais intensa na região de cruzamento entre a fratura vertical e a fratura horizontal. Verifica-se, na Figura 15 que o aumento da porosidade para cada um dos três nós de análise são os mesmos quando ocorre a completa dissolução da rocha.

Figura 14. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Variação da porosidade em relação a inicial (deltaporo) após 3 dias.



Fonte: O Autor

Figura 15. Caso 2 – Forma de dissolução a partir de fluxo descendente: (a) nós analisados na variação da porosidade inicial (delta poro), (b) evolução do deltaporo.



Fonte: O Autor

Trata-se, portanto, de um carste epigênico apresentando uma geometria similar a uma tulipa, forma esta verificada, qualitativamente, ao ser comparada com observações de campo ilustradas pelas imagens de afloramentos da Fm. Crato (laminitos) e da Fm. Ipubi (carbonatos) da Figura 16.

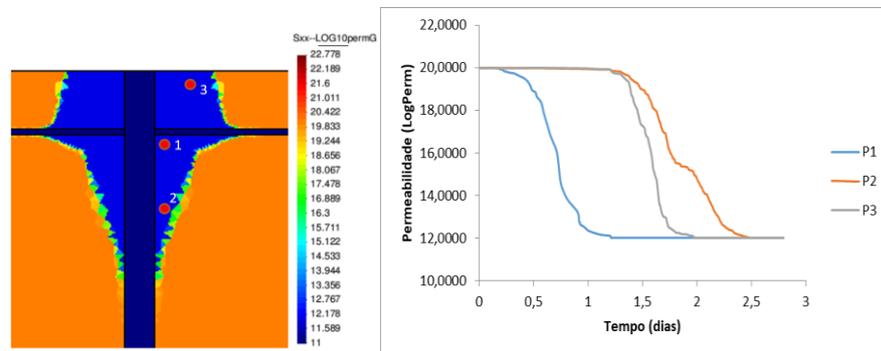
Figura 16. Zonas de dissolução observadas em afloramentos de Fm. Crato-CE e Fm. Jandaira-RN: análise qualitativa da simulação numérica.



Fonte: O Autor

Quanto à permeabilidade, pode-se observar na Figura 17 que ocorreu um aumento ao longo do tempo à medida que os minerais vão sendo dissolvidos e o carste se formando. O valor inicial da permeabilidade foi de  $1 \cdot 10^{-20} m^2$  e ao final do processo na região onde ocorreu a dissolução o valor alcançado foi de  $1 \cdot 10^{-12} m^2$ .

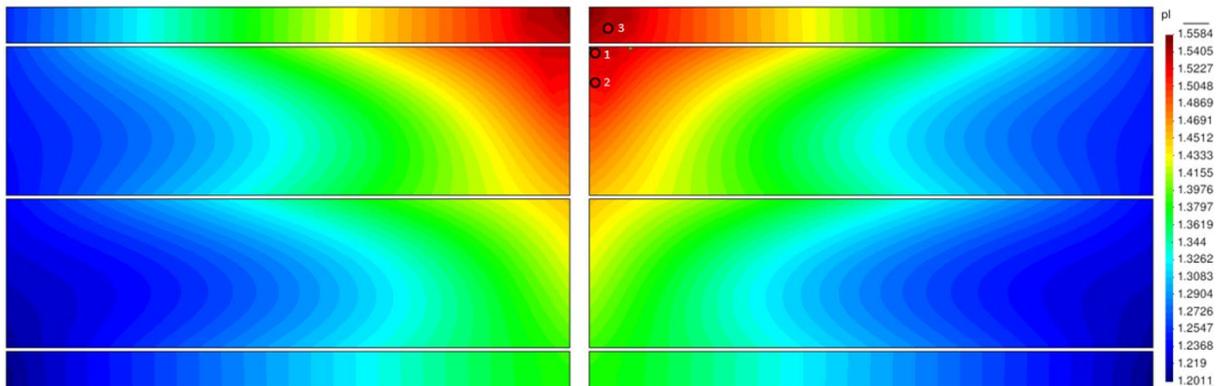
Figura 17. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: (a) nós analisados na variação da permeabilidade (Logperm), (b) evolução da permeabilidade.



Fonte: O Autor

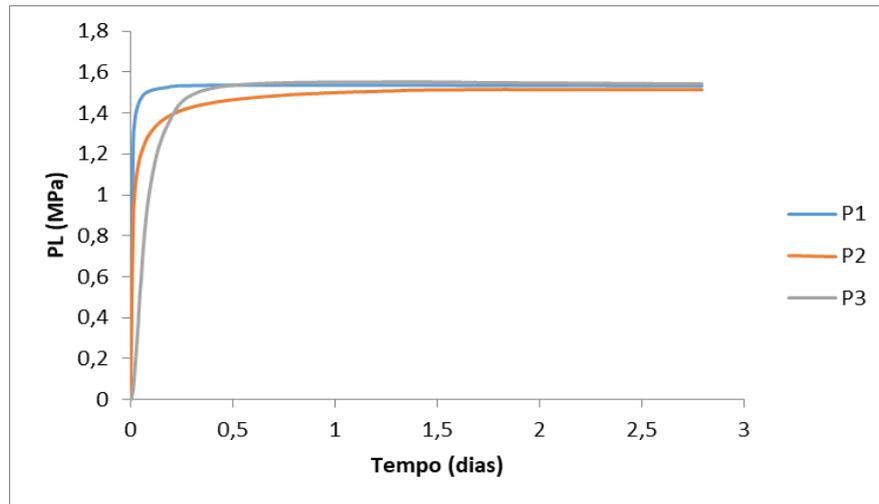
As Figuras 18 e 19 apresentam a distribuição da pressão de líquido e a sua evolução com o tempo para diferentes pontos na malha. É possível verificar através dos vetores de fluxo de fluido mostrados na Figura 20, o deslocamento do fluido tanto no interior das fraturas como nas zonas carstificadas.

Figura 18. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Variação da pressão de líquido após 3 dias.



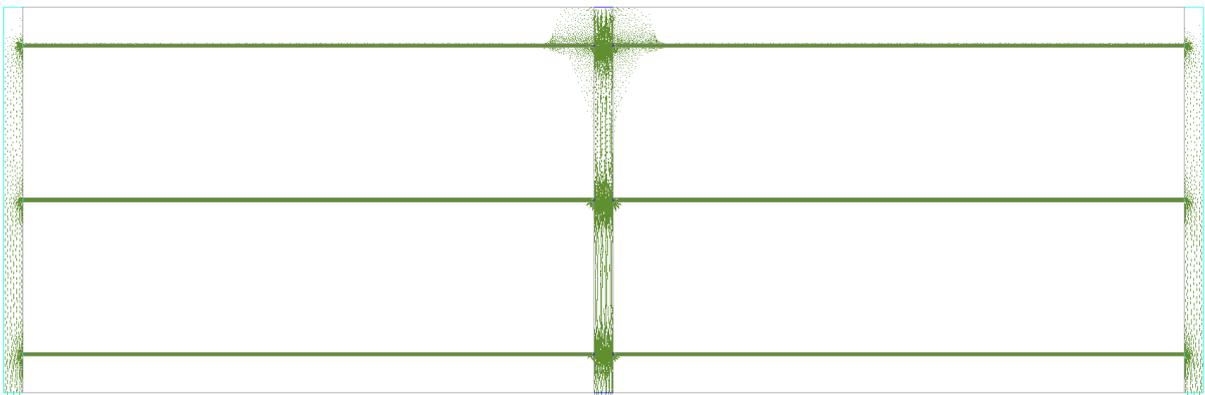
Fonte: O Autor

Figura 19. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: Evolução da pressão de líquido.



Fonte: O Autor

Figura 20. Caso 2 – Fluxo descendente no topo da fratura vertical: vetores de fluxo de fluido.

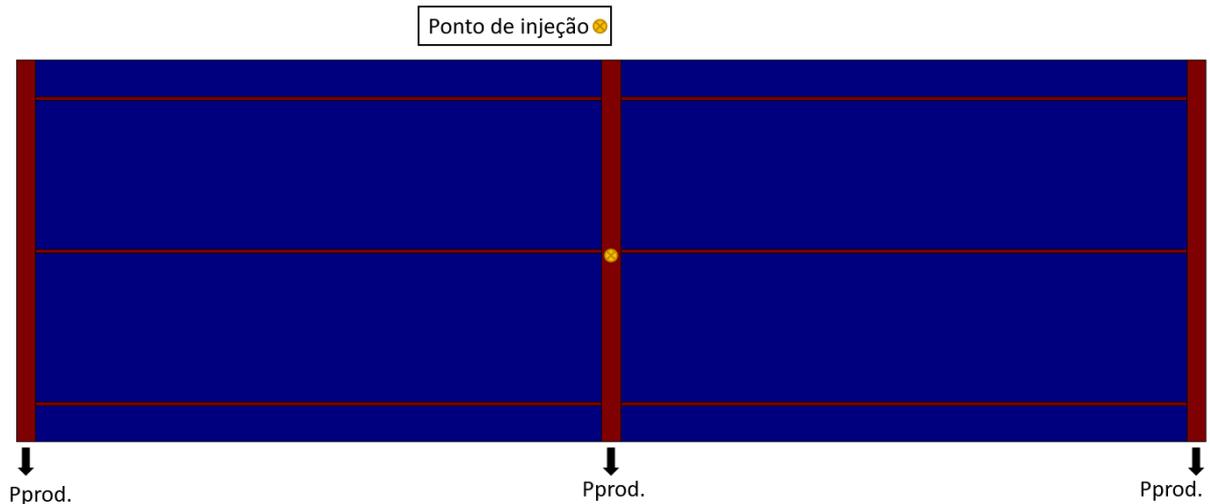


Fonte: O Autor

#### 4.3 CASO 03: CARSTIFICAÇÃO POR UM FLUXO NORMAL AO PLANO DE ANÁLISE.

O cenário deste caso consiste no mesmo problema, malha de elementos finitos e propriedades do Caso 2, porém a mudança se dá nas condições de contorno sendo agora prescrita uma pressão de entrada, como apresentada na figura 21, representando-se um fluxo normal ao plano de análise. No encontro de fraturas na parte central da geometria.

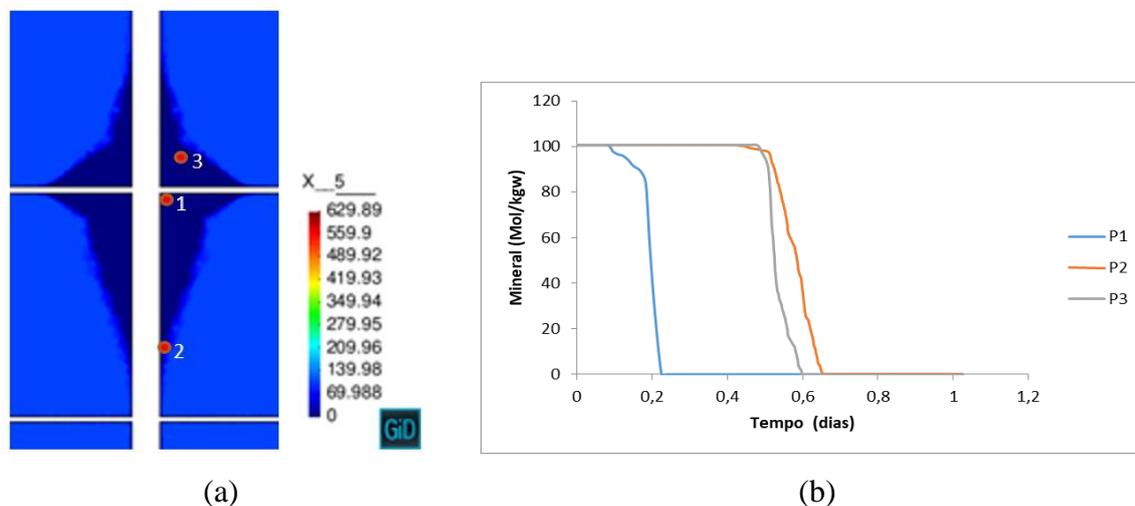
Figura 21. Fluxo normal ao plano de análise: Condição de contorno de fluxo.



Fonte: O Autor

Na figura 22 a seguir é possível observar que o processo de dissolução da rocha ocorreu mais rapidamente no encontro das fraturas onde o ponto de injeção de água está inserido, se comparado ao caso anterior. Nestas figuras verifica-se uma maior dissolução nos nós próximos aos cruzamentos da fratura vertical com as fraturas horizontais na região do ponto de injeção. A Figura 22 (b) apresenta a evolução da concentração total de minerais solúveis durante o processo de dissolução na direção do fluxo (eixo vertical). Inicia-se o processo de dissolução na região do cruzamento das fraturas e este processo vai se propagando ao longo tanto da fratura vertical como das fraturas horizontais.

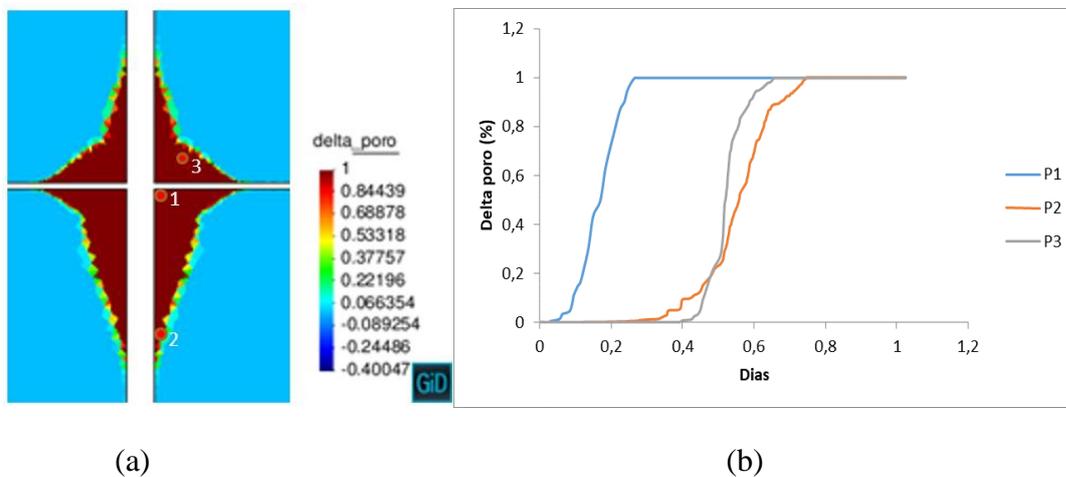
Figura 22. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Concentração do mineral após 1 dia de análise, Identificação da posição dos nós utilizados para a análise. (b) gráfico da evolução da concentração do mineral.



Fonte: O Autor

Já na Figura 23 apresenta a evolução temporal da variação da porosidade em relação a inicial, à medida que o fluxo vai dissolvendo os minerais da rocha, além de mostrar a evolução da abertura das fraturas na direção do fluxo e na direção perpendicular a fratura principal. Como observado no Caso 2, a relação de porosidade é inversamente proporcional ao da concentração do mineral reativo, ou seja, quanto menor a concentração do mineral maior é a porosidade. Desta forma evidencia-se a formação de carste com maior tendência nos cruzamentos.

Figura 23. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) delporopor (%) (b) evolução da porosidade nos pontos analisados.



Fonte: O Autor

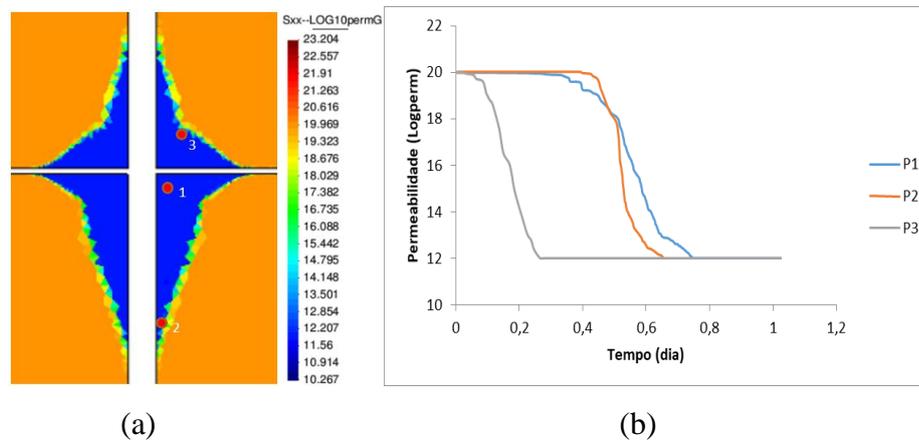
É possível observar que nos pontos 2 e 3 a dissolução, e consequentemente o aumento da porosidade, aconteceu praticamente no mesmo tempo. Mesmo o ponto 2 sendo localizado bem mais afastado do encontro das fraturas e do ponto de injeção, do que o ponto 3, porém está mais próximo da fratura vertical. Enquanto o ponto 3 está mais afastado das fraturas porém mais próximo do encontro das fraturas e do ponto de injeção.

A variação da permeabilidade (Figura 24) devida à dissolução da rocha seguiu comportamento semelhante ao apresentado no Caso 2, apresentando um aumento longo do tempo à medida que o mineral vai dissolvendo. O valor inicial da permeabilidade foi de  $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2$

Também foi possível constatar o aumento da permeabilidade logo no início da injeção do fluido e aumento gradativo da permeabilidade para os nós mais afastados do ponto de injeção, ou seja, o processo de carstificação se torna mais lento à medida em que a fonte de

fluxo principal se encontra distante uma vez que o fluido que flui nestas regiões já apresenta um aumento da concentração de minerais da rocha pela dissolução à montante. Logo, a existência de uma rede de fluxo devida à uma rede de fraturas é determinante no processo de dissolução, caso contrário, a partir de certo tempo será observada a precipitação de minerais, gerando um efeito inverso ao de carstificação e uma alteração diagenética do meio.

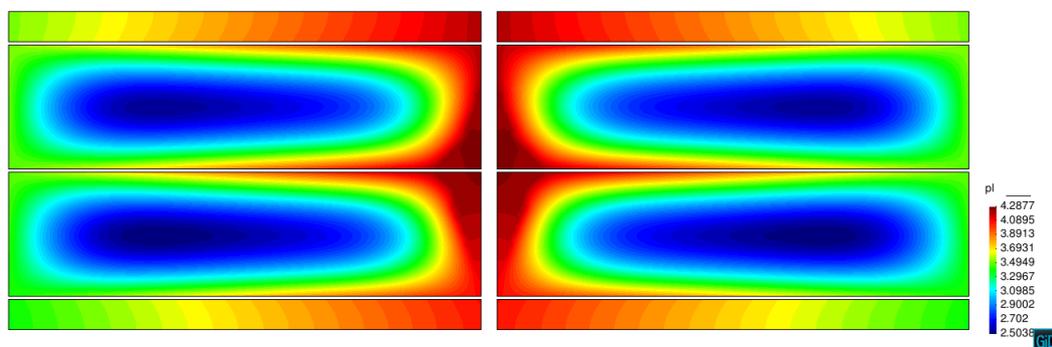
Figura 24. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Variação da permeabilidade após 1 dia, (b) evolução da permeabilidade nos pontos analisados.



Fonte: O Autor

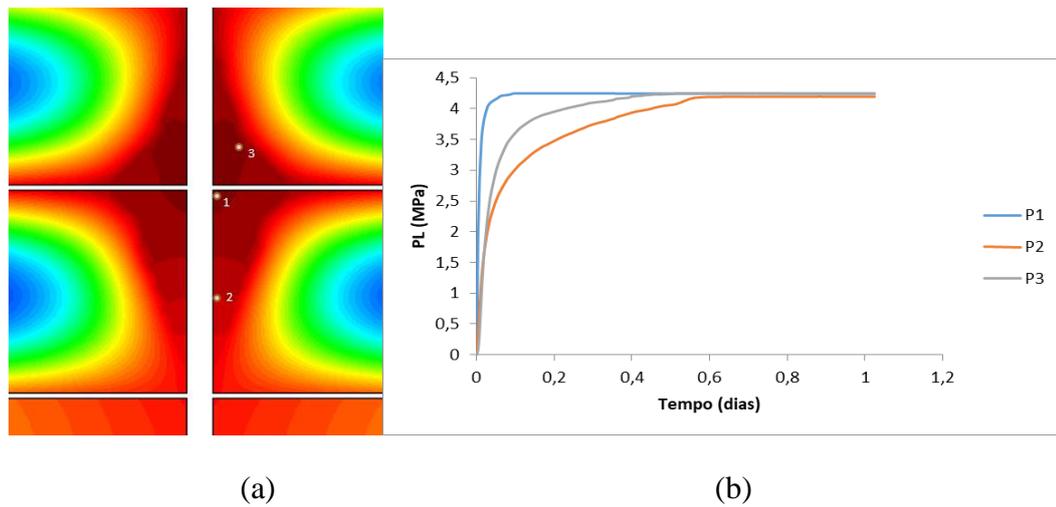
As figuras 25 e 26 apresentam a variação da pressão de líquido após 1 dia e a evolução da pressão de líquido nos pontos analisados. Onde é possível verificar um aumento maior de pressão de líquido na proximidade do poço injetor.

Figura 25. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: Variação da pressão de líquido em toda a malha após 1 dia.



Fonte: O Autor

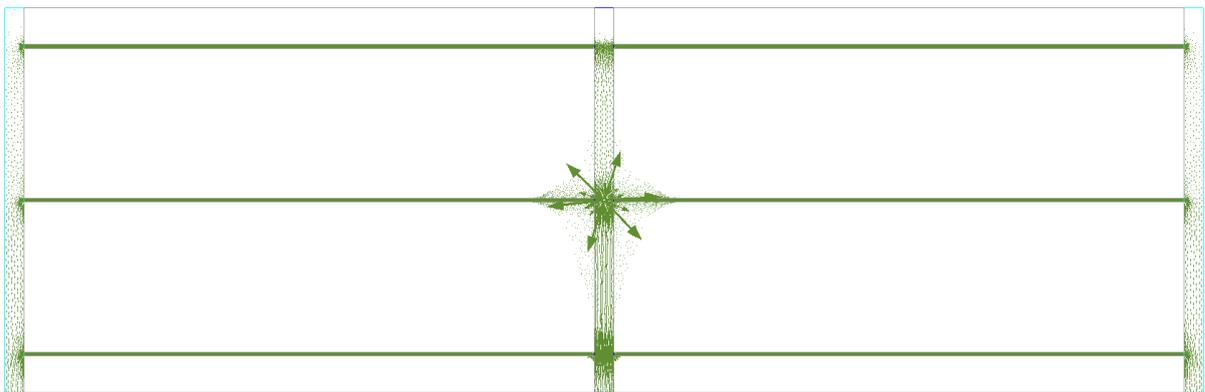
Figura 26. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) Variação da pressão de líquido nos pontos analisados após 1 dia, (b) evolução da pressão de líquido no sentido do fluxo e na direção normal a fratura principal.



Fonte: O Autor.

Os vetores de fluxo de fluido são apresentados na Figura 27, mostrando a ocorrência de fluxo no interior das cavidades.

Figura 27. Vetores de fluxo de fluido

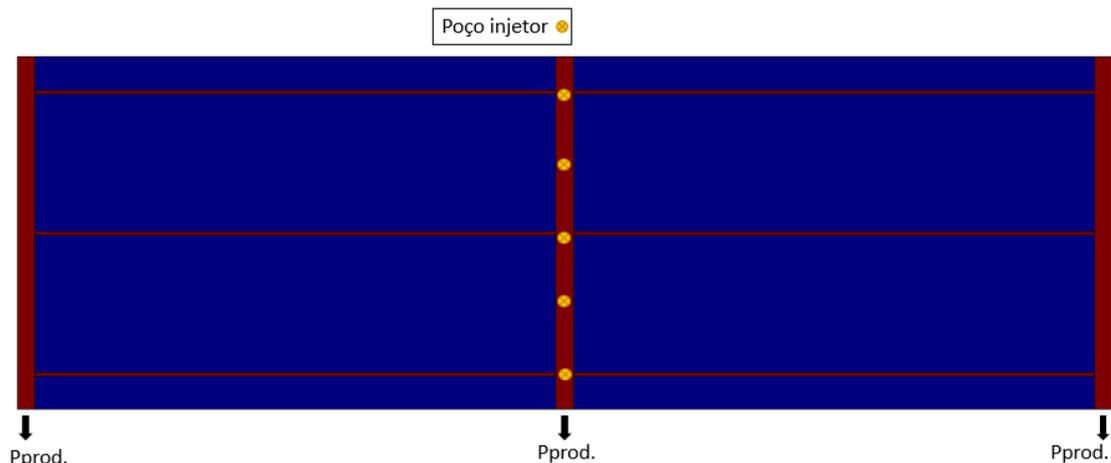


Fonte: O Autor.

Além das análises anteriores buscou-se também simular a entrada de fluido ao longo do eixo de toda fratura central. Foi então prescrita uma condição de pressão de 4,8 Mpa em

cinco pontos (poços injetores) ao longo da fratura vertical. As condições de contorno de saída se mantiveram nas bases das fraturas verticais, com uma pressão de 0,18 Mpa. Sendo o fluxo gerado por conta deste gradiente (figura 28).

Figura 28. Condição de contorno de fluxo.



Fonte: O Autor.

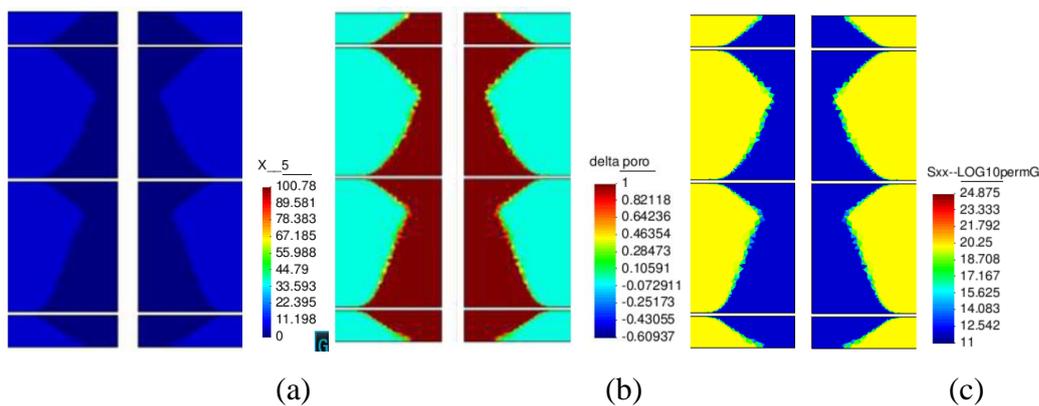
Na figura 29 (a) é apresentada a evolução da concentração total de minerais solúveis durante o processo de dissolução na direção do fluxo (eixo vertical). Inicia-se o processo de dissolução na região do cruzamento das fraturas e este processo vai se propagando ao longo tanto da fratura vertical como das fraturas horizontais.

Já a Figura 29 (b) é apresentado a variação da porosidade em relação a porosidade inicial (Deltaporo) à medida que o fluxo vai dissolvendo os minerais da rocha, além de mostrar a evolução da abertura das fraturas na direção do fluxo e na direção perpendicular a fratura principal. Como observado no Caso 2, a relação de porosidade é inversamente proporcional ao da concentração do mineral gipsita, ou seja, quanto menor a concentração do mineral maior é a porosidade. Desta forma evidencia-se a formação de carste com maior tendência nos cruzamentos, porém os quais podem chegar a dimensões maiores quando o processo de carstificação da região de um cruzamento de fraturas se une ao carste de outra região adjacente.

A variação da permeabilidade, figura 29 (c), devida à dissolução da rocha seguiu comportamento semelhante ao apresentado no Caso 1, apresentando um aumento longo do tempo à medida que o mineral vai sendo dissolvido. O valor inicial da permeabilidade foi de  $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2$  e ao final do processo o valor alcançado foi de  $1 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ .

Também foi possível constatar o aumento da permeabilidade logo no início da injeção do fluido e aumento gradativo da permeabilidade para os nós mais afastados do ponto de injeção, ou seja, o processo de carstificação se torna mais lento à medida em que a fonte de fluxo principal se encontra distante uma vez que o fluido que flui nestas regiões já apresenta um aumento da concentração de minerais da rocha pela dissolução à montante como foi visto anteriormente. Logo, a existência de uma rede de fluxo devido à uma rede de fraturas é determinante no processo de dissolução por proporcionar o transporte e renovação do fluido reativo.

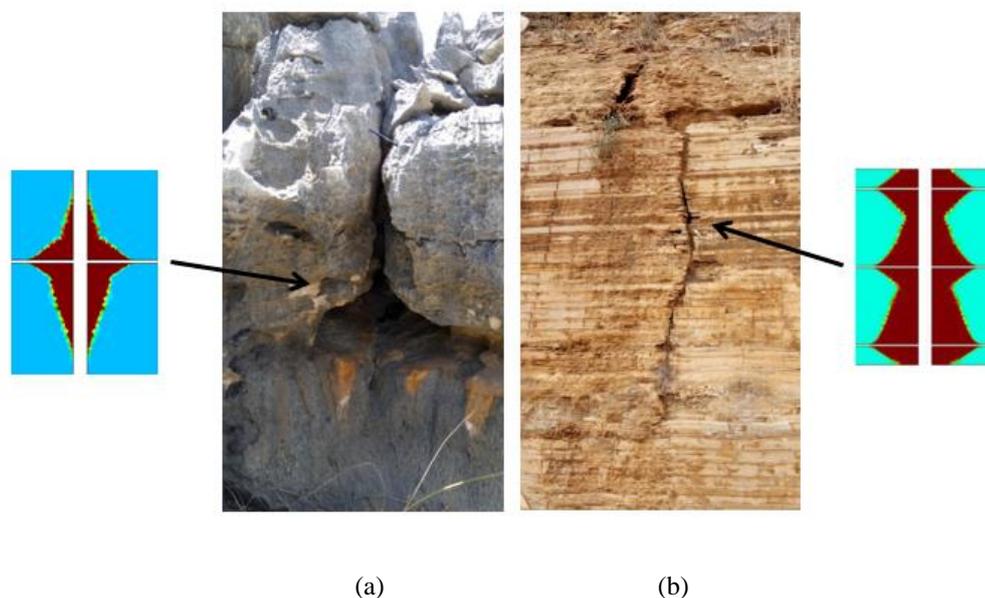
Figura 29. Caso 3 – Fluxo normal ao plano de análise: (a) variação da concentração de mineral X5, (b) variação da porosidade (deltaporo), (c) Variação do logaritmo da permeabilidade (Logperm), (d) variação da pressão de líquido (PL).



Fonte: O Autor.

Por fim, a Figura 30 apresenta a verificação qualitativa desta simulação com base em fotos de ocorrências em afloramentos da Fm. Crato e Jandaira, onde em casos nesta configuração, onde em casos nesta configuração, observa-se uma geometria de carstes similar às obtidas nas simulações numéricas.

Figura 30. Zonas de dissolução observadas em afloramentos das Formações Crato-CE (figura a) e Jandaíra-RN (figura b): análise qualitativa da simulação numérica.



Fonte: O Autor.

#### 4.3 - CASO 04: SIMULAÇÃO DE CARSTE HIPOGÊNICO EM REGIÃO COM DOBRA ANTICLINAL

O cenário deste caso consiste em um modelo sintético de um meio fraturado com a existência de uma dobra anticlinal na Formação, com o objetivo de verificar numericamente a influência da interação fratura-dobramento na geração e geometria de feições cársticas.

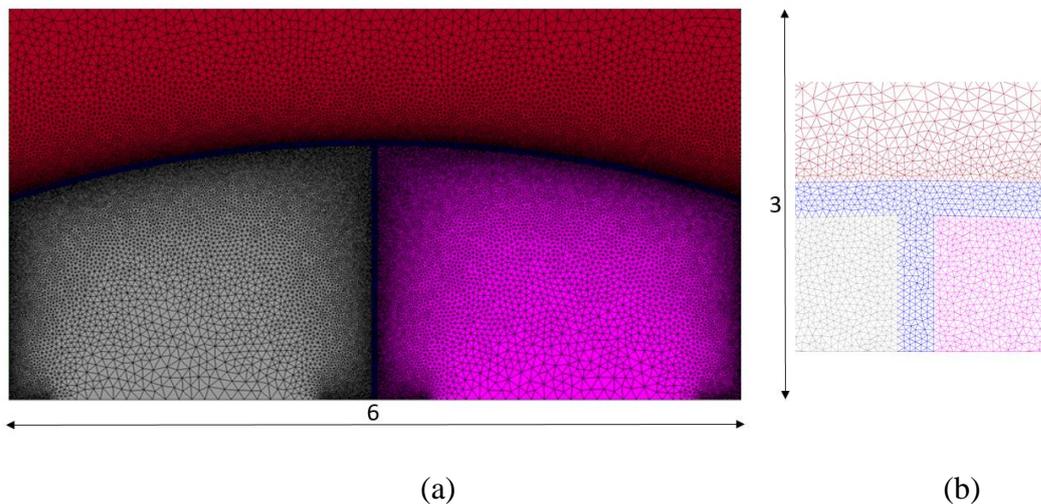
Empregou-se as propriedades dos casos anteriores, considerando um fluxo de água ascendente, sem levar em consideração a gravidade, com o intuito de simular a dissolução química gerando um carste hipogênico. Porém na análise não foi considerado o acoplamento térmico já que no sistema de geração de carste hipogênico é formado por águas hidrotermais. O intuito foi focar a interação hidro-química do processo.

O cenário sintético foi baseado em imagens de carste e esquemas apresentados por Ennes et al (2015). Em seu trabalho os autores avaliaram que a porosidade e a permeabilidade ao longo das zonas fraturadas nos carbonatos podem ser significativamente aumentadas pelo fluxo ascendente do fluido, resultando no desenvolvimento de carste hipogênico. Este estudo envolveu uma análise estrutural detalhada do sistema de cavernas mais longo da América do Sul para investigar a relação entre padrões de condutos cársticos e deformação regional. Com área de estudo englobando as cavernas Toca da Boa Vista (TBV) e Toca da Barriguda (TBR), as quais possuem, respectivamente, 107 km e 34 km de comprimento. Este sistema de

cavernas ocorre em carbonatos neoproterozóicos da Formação Salitre na parte norte do Cráton, São Francisco, Brasil. Os cinturões de dobramento que estão ao redor e nas bordas do cráton foram deformadas sob um regime compressivo. Com base na análise integrada das dobras e deformações frágeis nas cavernas e afloramentos da região circundante, os autores mostraram que a geometria da formação de carste está correlacionado com a geometria do dobramento, neste caso o dobramento anticlinal, e que o fluxo de fluidos e as vias de dissolução relacionadas têm uma relação estreita com eventos regionais de deformação, aumentando assim a nossa capacidade de prever padrões cársticos.

A geometria é apresentada na figura 31, bem como a malha de elementos finitos que é formada por 45.874 nós e 91.288 elementos tipo triangulo linear. O domínio possui 6 metros de comprimento por 3 metros de altura. Considerou-se uma fratura vertical e uma em arco contornando a parte inferior da dobra anticlinal. Ambas as fraturas possuem uma abertura de 5 centímetros.

Figura 31. Caso 4 - Modelo geológico, com fratura horizontal com uma certa curvatura por conta do dobramento da formação: (a) características e malha em elementos finitos, (b) detalhe do encontro das fraturas.

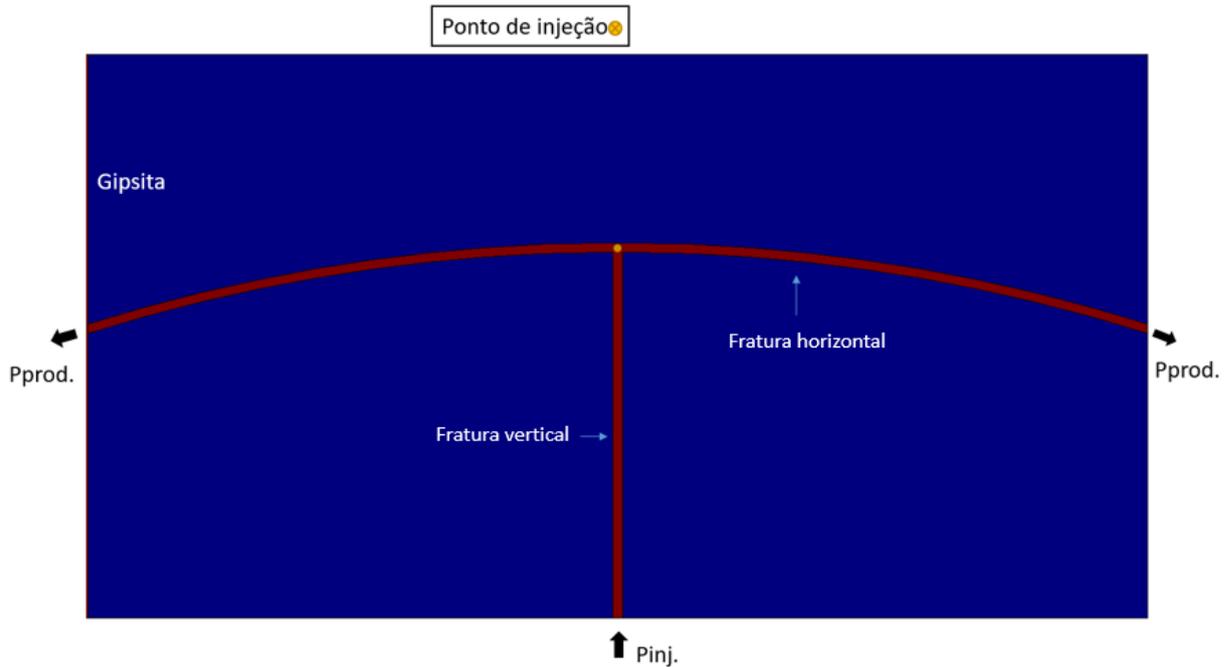


Fonte: O Autor.

Como condição de contorno foi imposta uma pressão de injeção de 4,8 Mpa e de produção de 0,18 Mpa, como é possível verificar na figura 32. Desta forma se induziu o fluxo de fluido nas fraturas devido a esse gradiente. Neste caso a entrada de água é prescrita na base da fratura vertical e outra no encontro das fraturas representando um fluxo normal ao plano de análise. As pressões de saída são aplicadas nas laterais esquerda e direita da fratura em arco (Figura 32). Esta orientação de fluxo foi prescrita com o intuito de simular a formação de

cavidades através do processo de carstificação hipogênica. Foi colocada essa condição de contorno de fluxo normal ao plano de análise próximo ao encontro das fraturas, representando uma fonte de fluido neste ponto, devido a uma fratura projetada na direção normal à secção transversal em análise.

Figura 32. Caso 4 - Condições de contorno de fluxo.



Fonte: O Autor.

As propriedades dos materiais adotadas na simulação do caso estão descritas na tabela

**Tabela 2: Propriedades dos materiais empregadas no caso 3.**

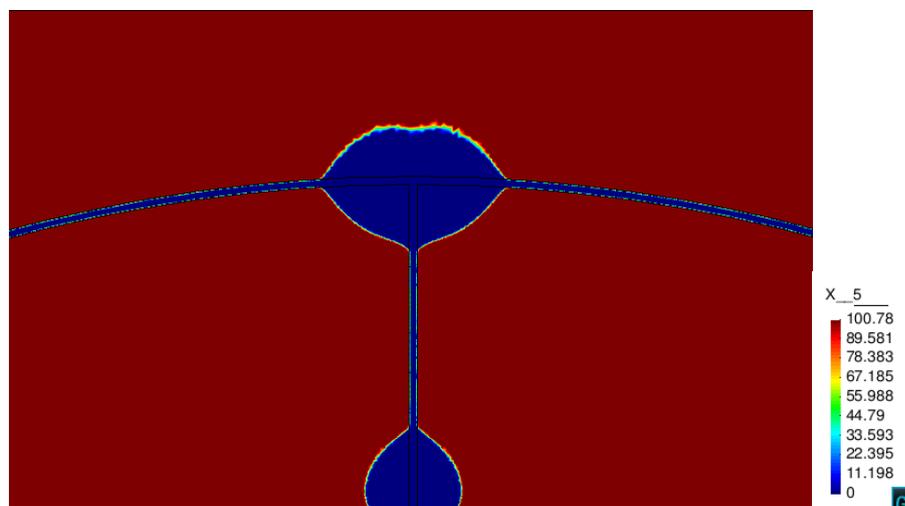
Porosidade do material	Rocha intacta	Fraturas
Permeabilidade (m <sup>2</sup> )	$1.10^{-20}$	$1.10^{-11}$
Porosidade	0,10	0,6

Para avaliação da dissolução da gipsita, é apresentado, na figura 33, a concentração do mineral ao final da simulação, após 200 dias de análise.

Na figura 34 são apresentados os resultados, nos pontos de análise, da variação da concentração do mineral com o tempo na região de contato fratura vertical e dobra. Foram

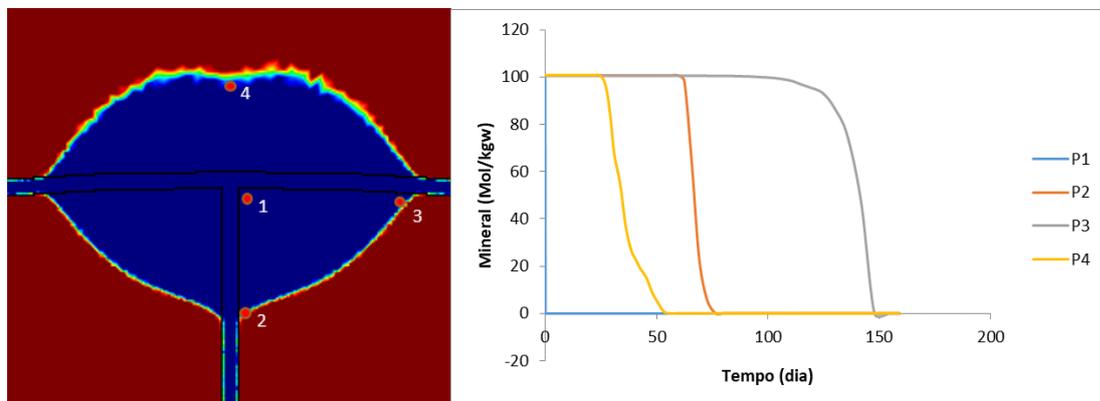
selecionados quatro nós (1, 2, 3 e 4) ilustrados na figura 34(a). Nestas figuras é possível verificar que o Ponto (1), próximo ao ponto de cruzamento das fraturas, apresenta uma dissolução mais rápida cerca de 3 horas. Em seguida acontece a dissolução no ponto 4, localizado no topo da cavidade, com a dissolução total acontecendo após cerca de 53 dias. No ponto 2, localizado próximo a fratura vertical, a dissolução acontece com cerca de 73 dias. E por último o ponto 3, localizado próximo a fratura horizontal, a dissolução acontece após cerca de 150 dias. Na figura 33 é possível ver a dissolução na base da fratura vertical onde está localizado um poço injetor em formato de cálice.

Figura 33. Caso 4 - Concentração total de minerais de gipsita (X5).



Fonte: O Autor.

Figura 34. Caso 4 – (a) Concentração total de minerais de gipsita e pontos a serem analisados, (b) Evolução da concentração do mineral.

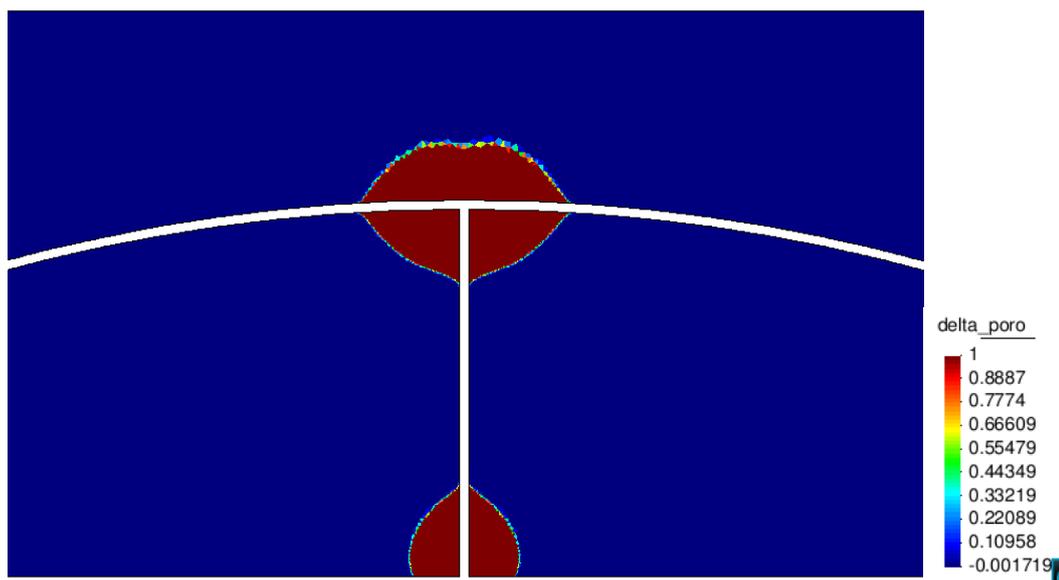


Fonte: O Autor.

Da mesma forma que os casos anteriores a dissolução foi maior no encontro das fraturas. A diminuição da concentração do mineral reativo acarretou o aumento da porosidade

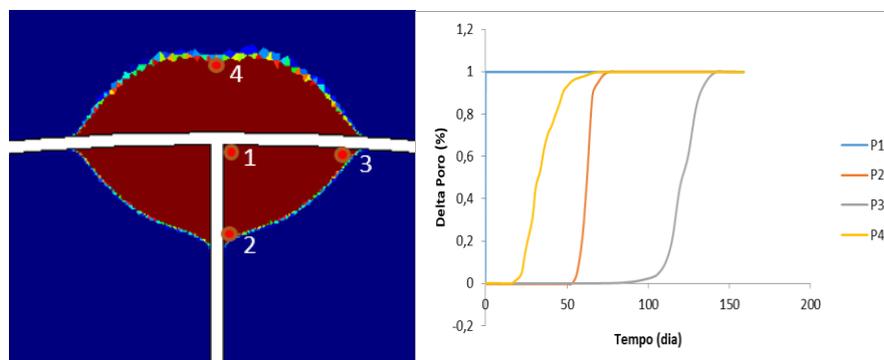
como é possível verificar na figura 35. Na figura 36 é apresentado a evolução da porosidade (Deltaporo) nos nós analisados, os quais são identificados na figura 36. Verificou-se que no ponto 4 inicia-se o processo de dissolução mais rapidamente que os pontos 2 e 3. Porém, após o início da dissolução, apresenta uma inclinação de reta menor que as retas dos pontos 2 e 3. Ou seja, na cavidade que está sendo gerada a dissolução acontece mais rapidamente nas regiões onde está mais próxima das fraturas.

Figura 35. Caso 4 – Variação da porosidade em relação a inicial (deltaporo) após 200 dias.



Fonte: O Autor.

Figura 36. Caso 4 – (a) Variação da porosidade (deltaporo) nos nós analisados, (b) evolução do deltaporo.

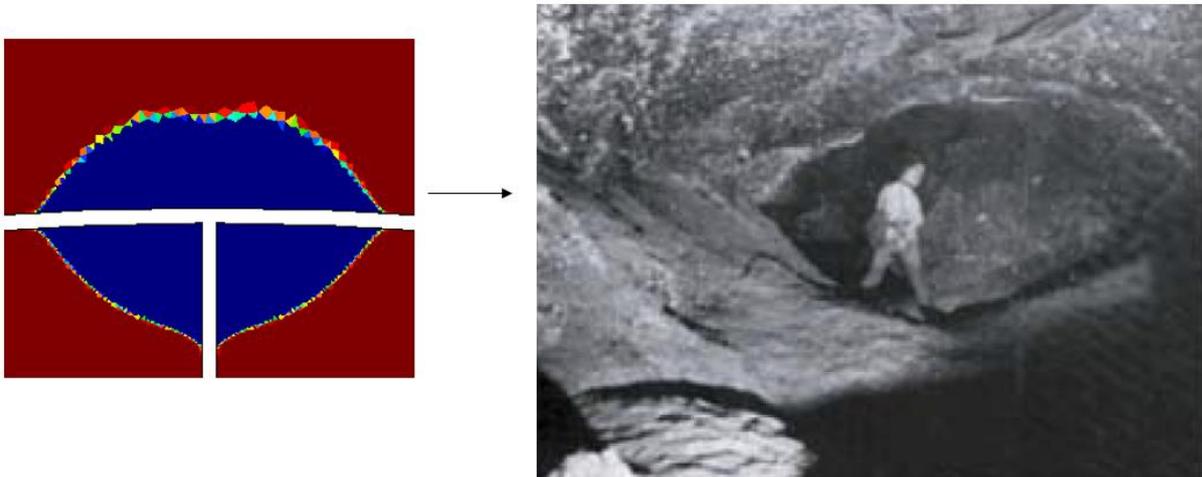


Fonte: O Autor.

Esta cavidade gerada se mostra como um carste hipogênico e a análise mostrou que a presença de dobramento, interrompendo a fratura vertical, influencia na geometria do carste, chegando-se a uma geometria diferente das observadas nos Casos 2 e 3 apresentados anteriormente.

Na figura 37 foi feita uma comparação geometria da cavidade do resultado da simulação com uma cavidade da caverna Optimystychna que é localizada em Korolivka, Ucrânia. Optimisticeskaja significa otimista em ucraniano, e é uma caverna de gesso, sendo a maior caverna de gesso do mundo. A caverna inteira está sob uma área de 2 km<sup>2</sup> em uma camada de gesso de menos de 20 m de espessura. As passagens da caverna são baixas. É formada uma densa rede em 3 níveis diferentes, tornando a caverna conhecida como caverna labirinto.

Figura 37. Comparação da geometria obtida no caso com zonas de dissolução observadas em afloramentos da caverna, formada em gipsita, Optimystychna, localizada na Ucrânia.



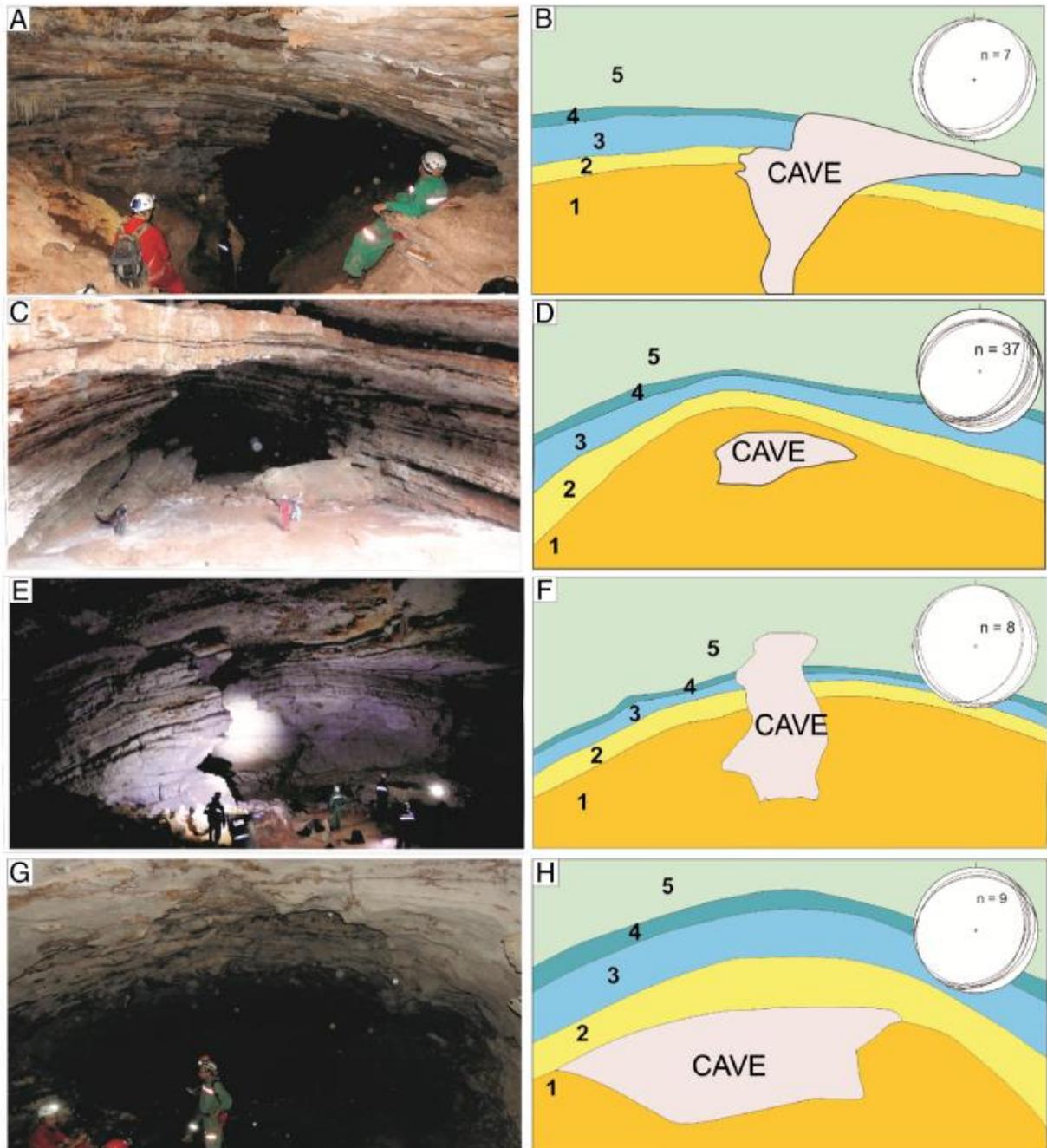
Fonte: Klimchouk, 2007.

Além disso, os resultados apresentaram geometrias semelhantes com as feições observadas na Formação Salitre por Ennes et al (2015), que correlacionam a presença do dobramento da formação com a geometria do carste de rochas carbonáticas.

Vale destacar que essas cavernas foram formadas em um meio heterogeneo e anisotropico e nas análises aqui realizadas a rocha foi tratada como um meio homogêneo e isotrópico. Apesar disso entende-se que a resposta foi qualitativamente satisfatória na

determinação da região de potencial carstificação bem como quanto ao tipo de geometria a ser esperada para uma configuração de meio fraturado deste tipo (ver figura 38).

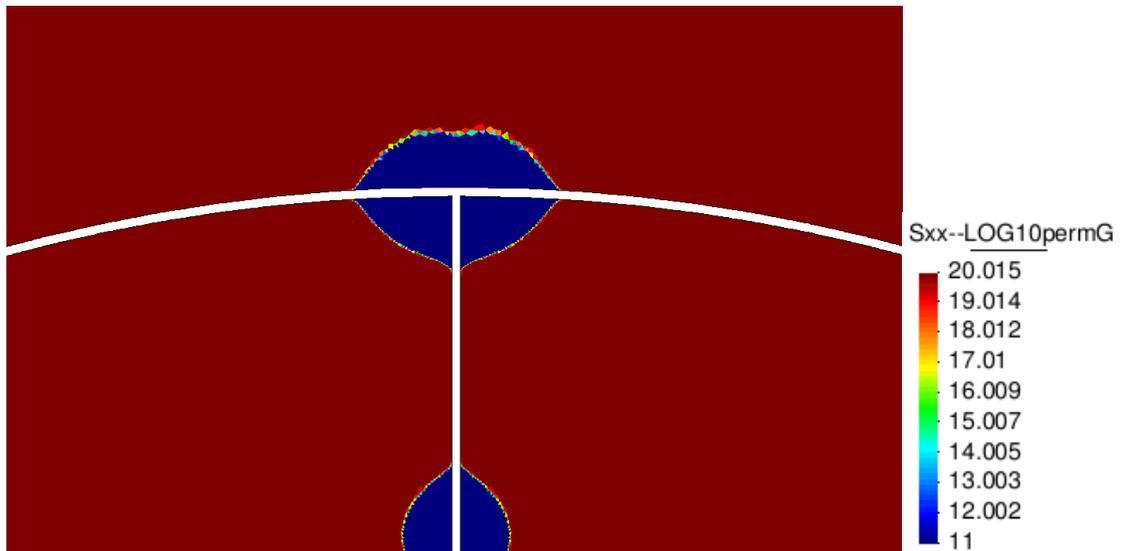
Figura 38. Feições da karst correlacionadas com dobramentos existente na formação das cavernas Toca da Boa Vista (TBV) e Toca da Barriguda (TBR).



Fonte: Ennes (2015).

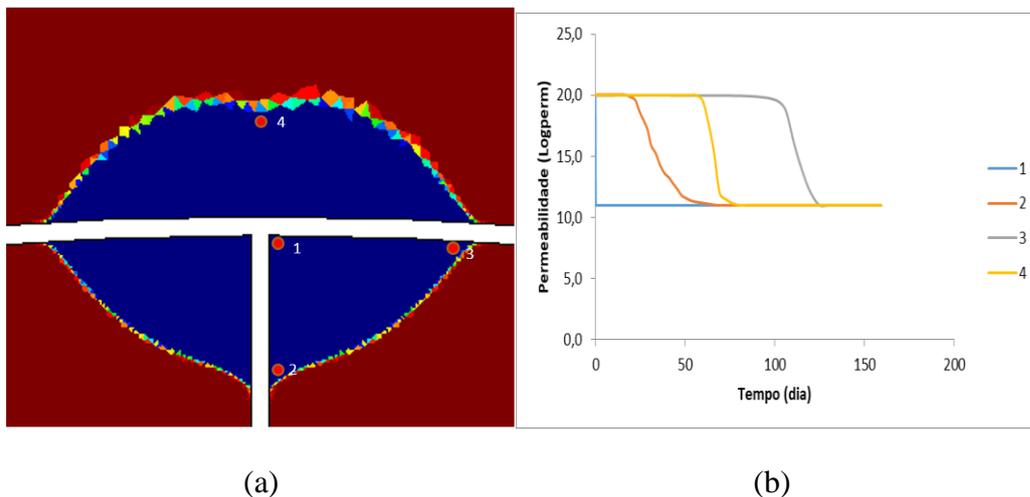
As figuras 39 e 40 apresentam a distribuição e evolução da permeabilidade indicando um aumento relevante que comprova a formação do carste, em coerência com a distribuição das concentrações de minerais reativos mostrada anteriormente.

Figura 39. Caso 4 – Variação da permeabilidade após 200 dias.



Fonte: O Autor.

Figura 40. Caso 4 – (a) Pontos escolhidos para análise da permeabilidade, (b) evolução da permeabilidade.

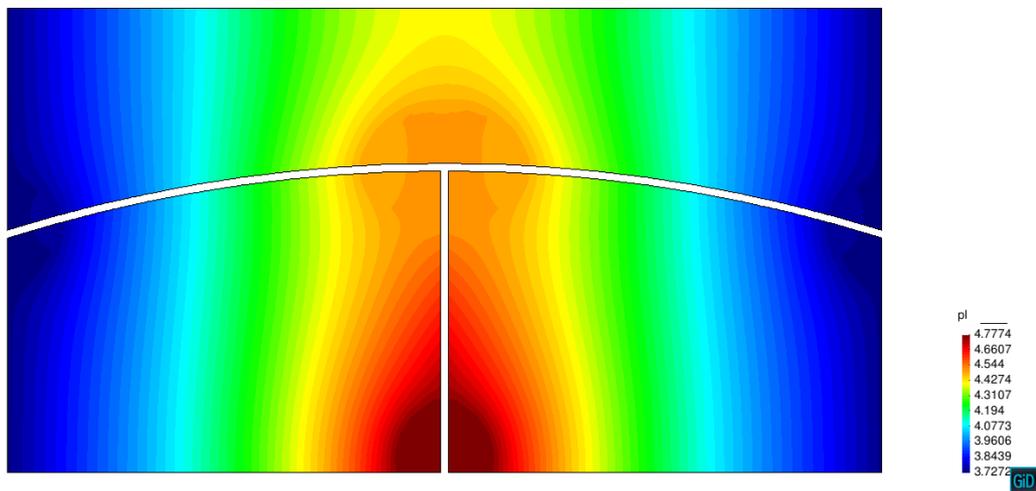


Fonte: O Autor.

Nas figuras 41 e 42 são apresentadas a variação da pressão de líquido que ocorreu durante a simulação numérica junto com a evolução da pressão. Pode-se notar o aumento da pressão de líquido dentro da cavidade formada pela dissolução da rocha. É possível verificar também, através dos vetores de fluxo de fluido mostrados na figura 43, o deslocamento do

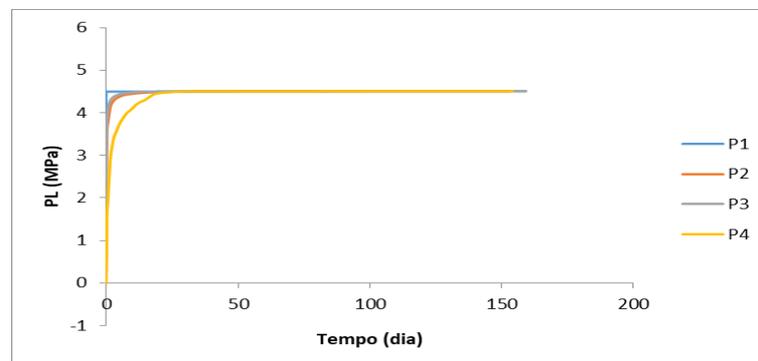
fluido tanto no interior das fraturas como nas zonas carstificadas. É possível verificar que as linhas de fluxos depois de entrar na cavidade se espalham pelo espaço dissolvido e depois convergem em direção para as falhas com o gradiente menor de pressão.

Figura 41. Caso 4 – Variação da pressão de líquido.



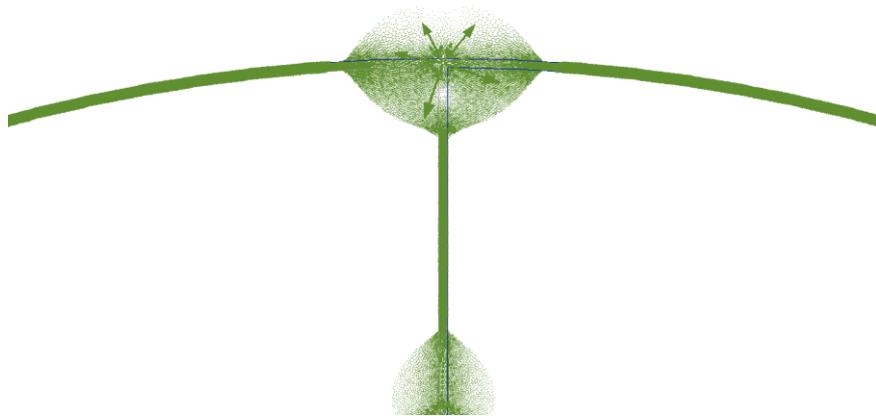
Fonte: O Autor.

Figura 42. Caso 4 – Evolução da pressão de líquido.



Fonte: O Autor.

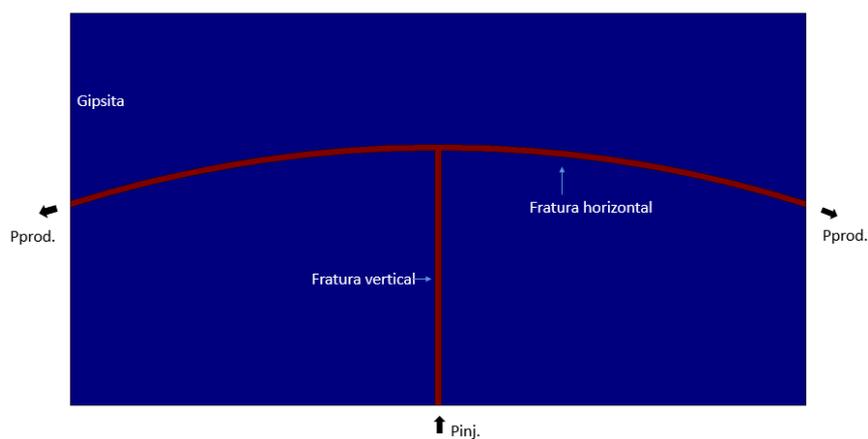
Figura 43. Caso 4 – Fluxo ascendente: vetores de fluxo de fluido.



Fonte: O Autor.

Por fim, optou-se também por analisar o mesmo problema, porém considerando a dissolução apenas da rocha acima da fratura horizontal, ou seja, as rochas abaixo da fratura em arco são inertes (Caso 05). Neste caso foi prescrita uma pressão de entrada de 4,8 MPa na base da fratura vertical e de saída de 0,18 MPa nas laterais esquerda e direita da fratura em arco. Diferente do caso anterior, não foi considerado um ponto de injeção no encontro das fraturas. Com isso o fluido chega em contato com a rocha reativa com todo seu potencial de dissolução (figura 44) ao contrário do caso anterior.

Figura 44. Condições de contorno.

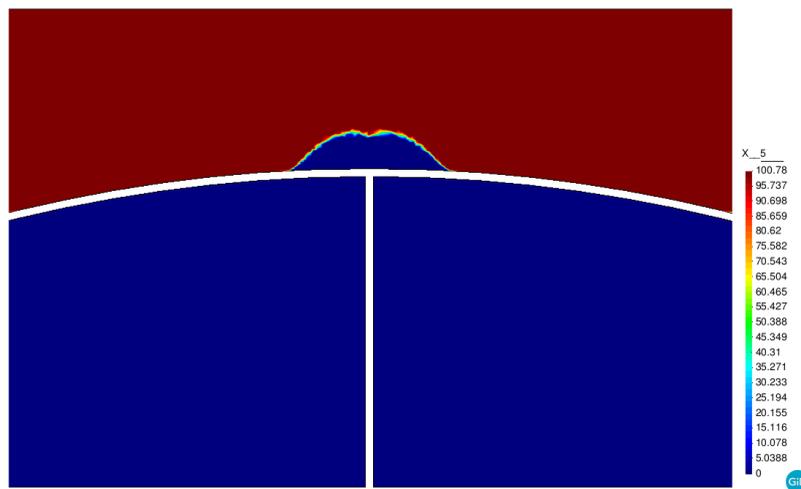


Fonte: O Autor.

Na figura 45 é possível observar a diminuição da concentração do mineral reativo na camada superior a fratura horizontal próximo ao encontro das fraturas. Na figura 46 (a) é

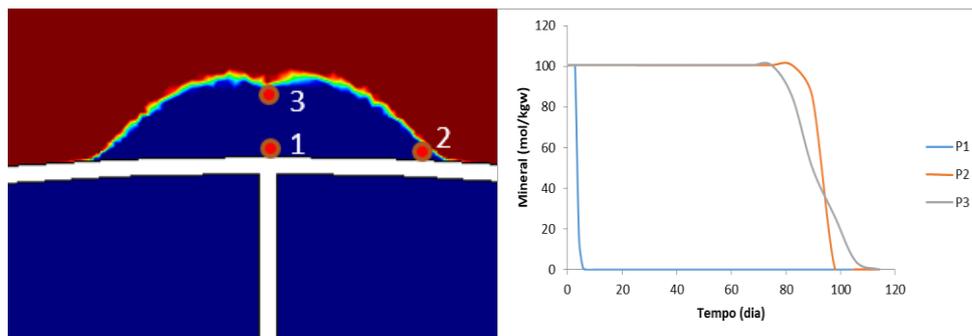
mostrado os pontos selecionados para análise do caso em questão. Na figura 46 (b) é possível ver a evolução da concentração do mineral nos pontos de análise. No ponto 1 a dissolução acontece quase que imediatamente já no ponto 2 e 3 a dissolução acontece próximo aos 100 dias. É possível verificar pela geometria da cavidade que o carste se desenvolve de forma mais intensa lateralmente, na direção da fratura em arco.

Figura 45. Caso 05 - Concentração de minerais reativos.



Fonte: O Autor.

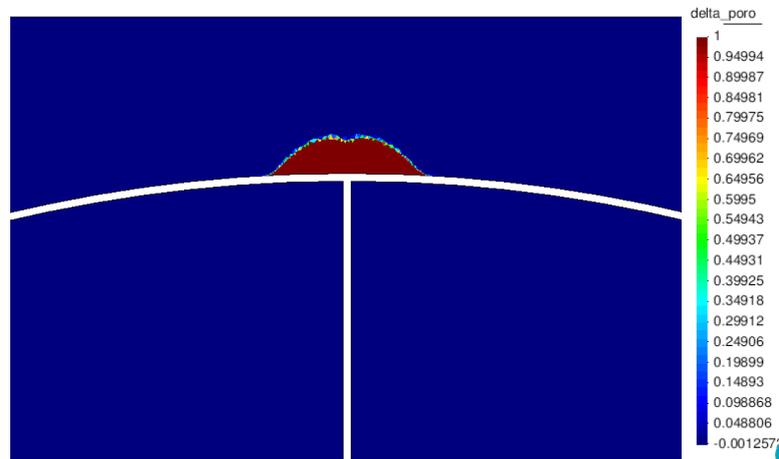
Figura 46. Caso 5 – Pontos selecionados para análise da concentração de mineral gipsita.



Fonte: O Autor.

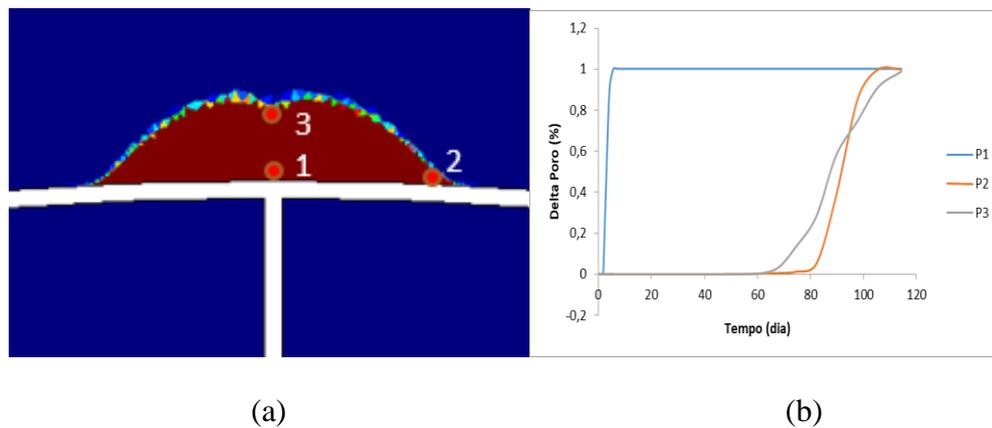
Simultaneamente com a dissolução da rocha solúvel acontece o aumento da porosidade. É possível identificar uma cavidade arqueada com esse tipo de geometria por conta do dobramento da formação. Na figura 47 é apresentado o aumento da porosidade (deltaporo). Na figura 48 (a) são apresentados os pontos escolhidos para análise e na figura 48 (b) é possível ver a evolução da porosidade (deltaporo).

Figura 47. Caso 5 – Variação da porosidade em relação a inicial (deltaporo) após 100 dias.



Fonte: O Autor.

Figura 48. Caso 5 – (a) Variação da porosidade (deltaporo) nos nós analisados, (b) evolução do deltaporo.



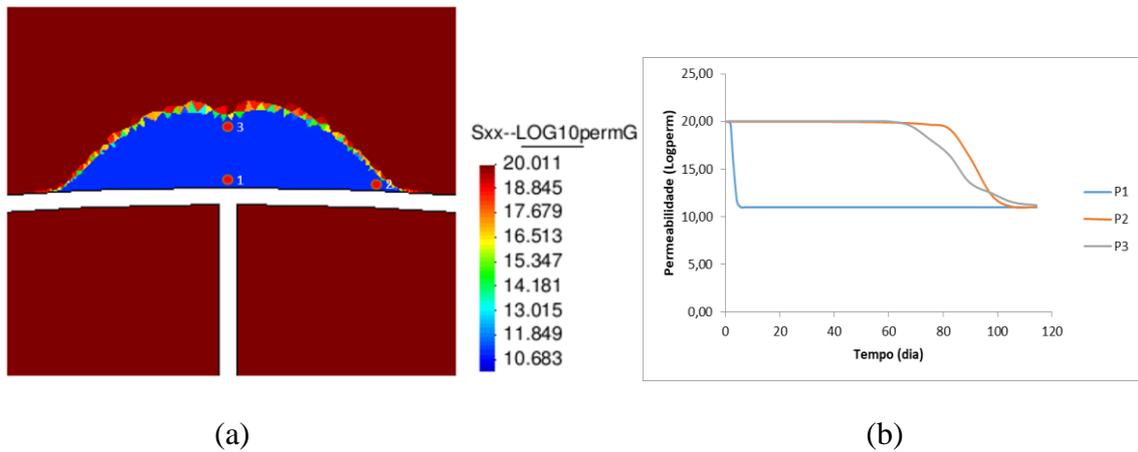
(a)

(b)

Fonte: O Autor.

Outra propriedade diretamente ligada a dissolução é a permeabilidade que apresentou característica coerente. Na figura 49 (a) é possível ver a variação da permeabilidade ao longo da análise e os pontos escolhidos para análise. Na figura 49 (b) é apresentado a evolução da permeabilidade ao longo do tempo nos pontos de análise.

**Figura 49. Caso 5 - (a) Pontos escolhidos para análise da permeabilidade, (b) evolução da permeabilidade.**

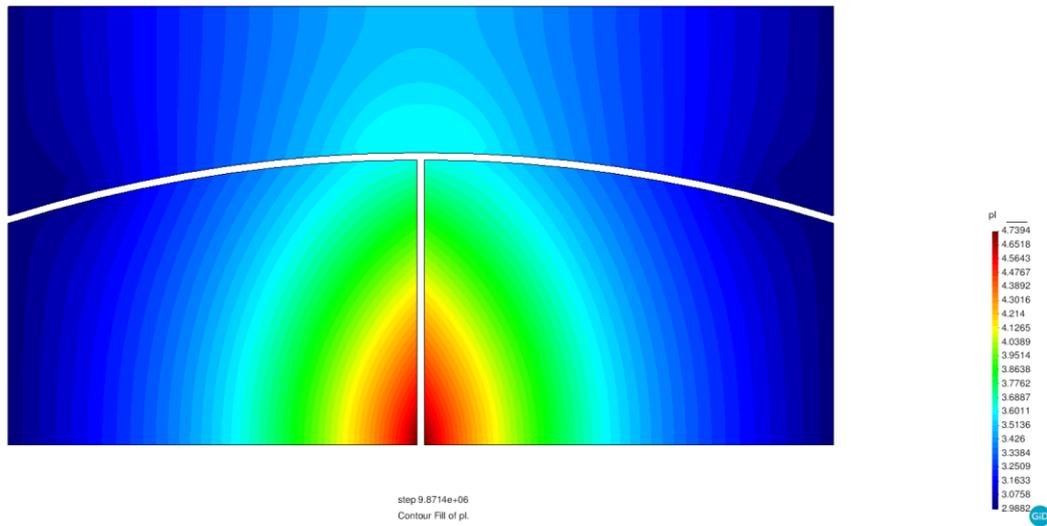


Fonte: O Autor.

O gráfico da Pressão de líquido (PL), figura 50, está coerente com as condições de pressões prescritas onde aparece uma maior pressão na base da fratura vertical onde foi inserido a maior pressão que tem valor de 4,8 Mpa. Na figura 51 é possível ver a evolução da pressão de líquido nos pontos em análise e na figura 52 é possível observa as linhas de fluxo.

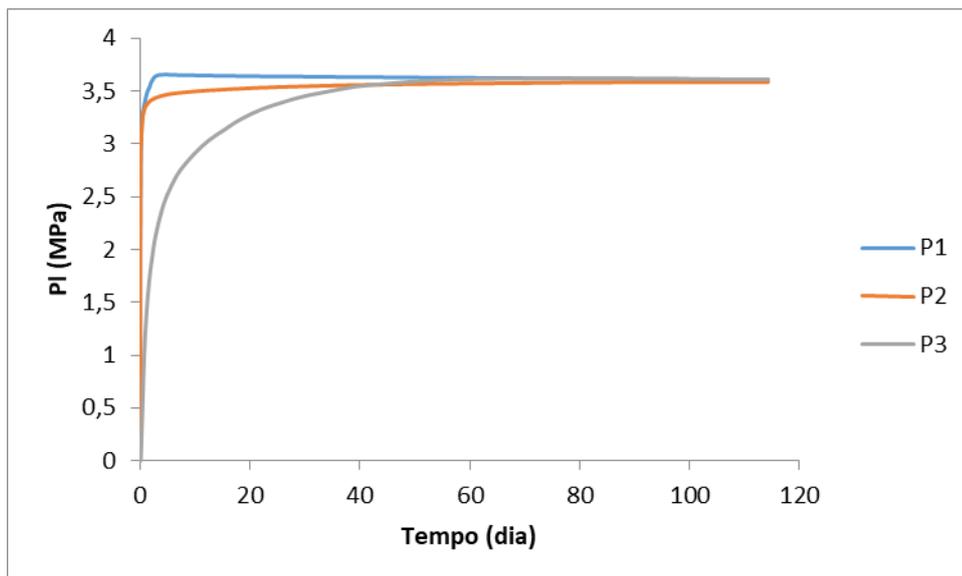
Portanto, verificou-se também a formação do carste, para esta configuração, e este apresentou geometria consistente com o que foi observado no trabalho de Ennes et al (2015).

Figura 50. Caso 5 - Variação da pressão de líquido.



Fonte: O Autor.

Figura 51. Evolução da pressão de líquido.



Fonte: O Autor.

**Figura 52. Linhas de fluxo.**



Fonte: O Autor.

## 5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

### 5.1 CONCLUSÕES

De acordo com os resultados apresentados o estudo da formação de carste se mostrou relevante para o entendimento das possíveis zonas de ocorrência e as geometrias destas zonas de dissolução e sua relação com as fraturas existentes na rocha. A abertura e rede de fraturas pode mudar, de forma significativa, o fluxo de fluido no maciço rochoso naturalmente fraturado e impactar diretamente na dissolução da rocha reativa.

Este comportamento evidencia a influência da interação entre fraturas, em seus cruzamentos, na direção de maior suscetibilidade à formação de carste. Nestas regiões o processo de difusão e cinética química se combinam com o fluxo de fluido mais intenso, acelerando a dissolução da rocha em relação à observada ao longo das fraturas sem cruzamento. Além disso na análise de uma cavidade em processo de carstificação, no encontro de fraturas, os pontos que estão mais próximos das fraturas e/ou do poço injetor são dissolvidos mais rapidamente.

Os resultados das simulações representaram qualitativamente, em comparação com imagens de afloramentos de Formações geológicas e blocos diagrama, a geração e geometrias de carste seja hipogênico ou epigênico. Os resultados foram satisfatórios mesmo que tendo sido considerada a simplificação de se admitir as fraturas com aberturas constantes, com paredes seguindo a hipótese de placas planas (sem rugosidade) e a rocha reativa admitida como um meio homogêneo e isotrópico.

Pode-se concluir também que a configuração geométrica, bem como a heterogeneidade faciológica do depósito sedimentar, influencia na geometria do carste. Isto pôde ser observado na simulação de um cenário considerando a existência de um dobramento anticlinal interrompendo a fratura vertical.

O software CodeBright se mostrou capaz de prever a formação de carste em diferentes configurações de arranjo de fratura-rocha reativa, empregando uma formulação de transporte reativo.

Os estudos aqui realizados podem ser aplicados não só para modelar processos de gênese de carste em virtude de fluidos meteóricos ou hipogênicos, como também tem aplicação direta a problemas envolvendo produção de reservatórios de petróleo.

Neste caso, no estudo de um reservatório de petróleo com injeção de fluido reativo em regiões próximas de fraturas, pode-se prever os pontos com mais possibilidade de forma cavidades bem como analisar as modificações de propriedades acarretadas pela dissolução química.

## 5.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para pesquisas posteriores na linha de estudo da formação de cavidades em rochas sugere-se:

- Realização de ensaios experimentais com a existência de fissuras de forma a serem reproduzidos pela análise hidro geoquímica e mecânica;
- analisar modelos reais considerando heterogeneidade e anisotropia do meio;
- utilizar a modelagem com acoplamento termo-hidro-mecânico e químico do problema reativo com o objetivo de analisar a resposta geomecânica da rocha ao longo do processo de carstificação;
- realizar melhorias na formulação matemática de forma a simular o processo de dissolução em rochas carbonáticas.

## REFERÊNCIAS

- Auler, A. *Hydrogeological and Hydrochemical Characterization of The Matozinhos – Pedro Leopoldo Karst, Brazil*. Bowling Green: Faculty of the Department of Geography and Geology / Western Kentucky. 110p. (Thesis, Master of Science). 1994.
- Auler, A., Rubioli, E. e Piló, L. B. Santuário subterrâneo. *Revista ciência hoje*, Rio de Janeiro, n. 101, p. 70-71. 1994
- Auler, A.S., Smart, P.L. *The influence of bedrock-derived acidity in the development of surface and underground karst: evidence from the Precambrian carbonates of semi-arid Northeastern Brasil*. *Earth Surf. Process. and Landforms* 28, 157-168. 2003
- Bear, J. *Dynamics of fluids in porous media*. U.S.A: American Elsevier Publishing Company, 764p. 1972.
- Bögli, A. *Erosion par melange des eaux*. *Internat. Jour. Speleology*. N.1, p. 61-70. 1964.
- Bögli, A. *Karst Hydrology and Physical Speleology*. Berlin: Springer Verlag, 284p. 1980.
- Corbel, J. *Erosion en terrain calcaire*. *Ann Geog.* 68, p. 97-120. 1959.
- Elbachá, A. T. *Estudo da Influência de alguns Parâmetros no Transporte de Massa em Solos Argilosos*. Rio de Janeiro, 1989. 178 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO.
- Ennes, R., Bezerra, F., Nogueira, F., Balsamo, F., Klimchouk, A., Cazarin, C. Auler, A. *Superposed folding and associated fracturing influence hypogene karst development in Neoproterozoic carbonates, São Francisco Craton, Brazil, Elsevier B. V.. 1-16. 2005.*
- Fetter, C. W. (1993), *Contaminant Hydrogeology*. Macmillan Publishing Company. New York.
- FORD, D.; WILLIAMS, P. *Karst geomorphology and hydrology*. London, Unwin Hyman. 601 p. 1989.
- Ford, D.C. *Karst geomorphology, caves and cave deposits: A review of North American contributions during the past half century*. In: Harmon, R.S. and Wicks, C.W. (Eds.), *Perspectives on Karst Geomorphology, Hydrology and Geochemistry*, GSA Special Paper 404, Boulder, Colorado, 1-14. 2006
- Guimarães L. do N. 2002. *Análisis multi-componente no isoterma en medio poroso deformable no saturado*. Phd Thesis, Geotechnical Engineering Department, Technical University of Catalunya, Spain.
- HARDT, Rubens et al. *Exemplos Brasileiros de Carste em Arenito: Chapada dos Guimarães (MT) e Serra de Itaqueri (SP)*. *Revista Espeleo-Tema*, Campinas-SP, v. 20, n. 1/2, p. 7-23, dez. 2009.

HARDT R.; RODET J. ; PINTO S. *O carste, produto de uma evolução ou processo? Evolução de um conceito. Revista de Geografia – UFPE, V. 8, 110-124. 2010.*

Harvie, C., Greenberg, J. & Weare, J. 1987. *A chemical equilibrium algorithm for highly non-ideal multiphase systems: Free energy minimization. Geochimica et Cosmochimica Acta, 51, 1045-1057.*

HASSUI, Y. ; MIOTO, J. A. *Geologia estrutural aplicada. 1.ed. São Paulo: ABGE/Grupo Votorantim. 204p. 1992.*

Hill, C.A. *Sulfuric acid hypogene karst in the Guadalupe Mountains of New Mexico and West Texas.- In: Klimchouk, A. et al. (eds.) Speleogenesis: Evolution of Karst Aquifers. National Speleological Society, pp. 309–316, Huntsville. 2000.*

Jennings, J. N. *Karst Geomorphology. Oxford: Basil Blackwel. 281 p. 1985.*

Klimchouk, A.B. *Speleogenesis under deep-seated and confined settings. In: Klimchouk, A., Ford, D.C., Palmer, A.N. and Dreybrodt, W. (Eds.), Speleogenesis: Evolution of karst aquifers. National Speleological Society, Huntsville, 244-260. 2000.*

KLIMCHOUK A.B., FORD D.C., PALMER A.N., DREYBRODT W. Eds. *Speleogenesis – evolution of karst aquifers. National Speleological Society : 527 p. 2000.*

Klimchouk, A. B. *Hypogene Speleogenesis: Hydrogeological and Morphogenetic Perspective. Special Paper no. 1, National Cave and Karst Research Institute, Carlsbad, NM, 106 pp. 2007.*

Lehmann, H. *Morphological Studies in Java. In: Sweeting, M. M. (Ed). Karst Geomorphology. Hutchinson Ross Publishing Company: Benchmark Papers in Geology /59. P.320-328. 1993*

Lichtner, P. 1985. *Continuum model for simultaneous chemical reactions and mass transport in hydrothermal systems. Geochimica et Cosmochimica Acta, 49, 779-800.*

Melo, L. M. P. *Análise numérico-experimental de rochas carbonáticas sintéticas submetidas à injeção de um fluido reativo. Dissertação (Mestrado em Engenharia civil)- Universidade Federal de Pernambuco, Universidade Federal de Pernambuco, RECIFE, 77 p. 2012.*

MESTRINHO, S. S. P. *Geoquímica das Águas Subterrâneas. In: FEITOSA, F. A. C., FILHO, J. M., FEITOSA, E. C. e DEMETRIO, J. G. Hidrogeologia Conceitos e Aplicações / organização e coordenação científica. 3 ed. Rio de Janeiro: CPRM e LABHID, 2008, p.359-379. MESTRINHO, S. S. P. Qualidade das Águas. In: GONÇALVES, V. G. e GIAMPÁ, C. E. Q. Águas Subterrâneas e poços tubulares. São Paulo: Signus, 2006, p.99-136.*

MERKEL, B. J. e FRIEDRICH, B. P. *Groundwater Geochemistry: A Practical Guide to Modeling of Natural and Contaminated Aquatic Systems. Nordstrom: Darrell K. Nordstrom, v.XII. 2008. (CD-Rom).*

Miranda, T. S., Barbosa, A., Gomes, I. F., Santos, R. F., Neumann, V. H., Matos, G. C., Alencar, M. (2012). *Applying scanline techniques to geological/geomechanical modeling of fracturing systems in carbonate and evaporite deposits from Araripe Basin, NE Brazil*. *Boletim de Geociências da Petrobras*, v. 20, no 1-2, 305-326.

Miranda, T. S ; Santos, R. F. V. C. ; Barbosa, J. A. ; Gomes, I. F. ; Alencar, M. L. ; Correia Filho, O. J. ; Falcao, T. ; Gale, J. ; Neumann, V. H. . *Quantifying aperture, spacing and fracture intensity in a carbonate reservoir analogue: Crato Formation, NE Brazil*. *Marine and Petroleum Geology* , v. 97, p. 556-567, 2018.

Mitchell, J. K. *Conduction Phenomena: from theory to geotechnical practice*. 31 st. 1991

Olivella, S., J. Carrera, A. Gens & E. E. Alonso. (1994). *Nonisothermal Multiphase Flow Of Brine And Gas Through Saline Media*. *Transport in Porous Media*, **15**, 271-293.

Olivella, S. 1995. *Nonisothermal Multiphase Flow of Brine and Gas Through Saline Media*. Phd Thesis. Departamento de ingeniería del terreno, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España.

Palmer, N. *Origin and morphology of limestone caves – Geological Society of America Bulletin*, 103, 1, 1-21. 1991.

Palmer, A.N. *Maze origin by diffuse recharge through overlying formations*. In: Klimchouk A., Ford D., Palmer A. and Dreybrodt W. (Eds.), *Speleogenesis: Evolution of Karst Aquifers*. Huntsville: National. Speleological Society, 387-390. 2000.

PARKHURST, D. L. e APPELO, C. A. J. *User's guide to PHREEQC (Version 2): A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report*. 1999. 310 p.

PILÓ, Luis B. *Geomorfologia Cárstica*. In: *Revista Brasileira de Geomorfologia*. São Paulo, 2000. p. 88-102. v. 1.

Reed, M. 1982. *Calculation of multicomponent chemical equilibria and reaction processes in systems involving minerals, gases and an aqueous phase*. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, 513-528.

Rocha, Rodrigo P. A.; Cruz, Manuel E. *A hybrid solution for simulation of 2-D contaminant Transport in Heterogeneous Subsurface System*. In: *2nd International Conference on Computation Heat and Mass Transfer, Rio de Janeiro Anais.[s.n.]*, 2001.

Rubin, J. 1983. Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions. *Water Resour. Res.*, 19, 1231-1252.

Saaltink, M., Ayora, C. & Carrera, J. 1998. A mathematical formulation for reactive transport that eliminates mineral concentrations. *Water Resour. Res.*, 34, 1649-1656.

SKIBA, Yuri. *Métodos y esquemas numéricos: un análisis computacional*. 1º. ed. México: Universidad Nacional Autónoma de México, 2005. 433 p. v. 1

Williams, P. W. Illustrating morphometric analysis of karst with examples from New guinea. *Zeitschrift fur Geomorphologie*, n. 15, p. 40-61. 1971.

Worthington, H., Ford, C. Borehole tests for megascale channeling in carbonate aquifers: Proceedings, XXVI Congress of the International Association of Hydrogeologists, Edmonton, Alberta, June 5th-9th 1995.

White, W. B. *Geomorphology and hidrology of karst terrains*. 1.ed. Oxford: Oxford University Press. 464 p. 1988.