

Este exemplar corresponde a reexatção final
da tese defendida por ANDRÉ DE
GASPERI e aprovada
pela comissão julgadora em 07/12/1999


ORIENTADOR

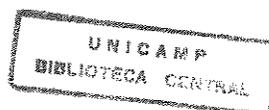
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

Modelagem Numérica da Salinização da Água de Formação e da Migração Secundária de Hidrocarbonetos na Bacia de Sergipe

Autor : André De Gasperi

Orientador: Hung Kiang Chang

54/99



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO**

**Modelagem Numérica da Salinização da Água
de Formação e da Migração Secundária de
Hidrocarbonetos na Bacia de Sergipe**

Autor : **André De Gasperi**

Orientador: **Hung Kiang Chang**

Curso: Engenharia de Petróleo.

Dissertação de mestrado apresentada à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Petróleo.

Campinas, 1999

S.P. - Brasil

1797400071061

UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	D363m
V.	Ex.
TOMBO BC/	41080
PROC.	278/00
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	13-06-00
N.º CPD	

CM-00142035-4

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

D363m De Gasperi, André
Modelagem numérica da salinização da água de
formação e da migração secundária de hidrocarbonetos
na Bacia de Sergipe / André De Gasperi.--Campinas,
SP: [s.n.], 1999.

Orientador: Hung Kiang Chang
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Difusão. 2. Salinização da água. 3. Águas
subterrâneas. 4. Petróleo - Geologia. I. Hung, Kiang
Chang. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO**

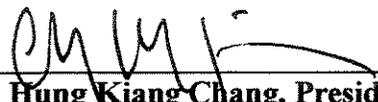
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Modelagem Numérica da Salinização da Água
de Formação e da Migração Secundária de
Hidrocarbonetos na Bacia de Sergipe**

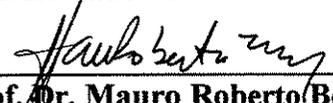
Autor : **André De Gasperi**

Orientador: **Hung Kiang Chang**

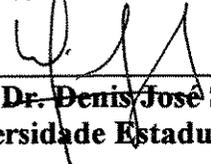
Banca Examinadora:



Prof. Dr. Hung Kiang Chang, Presidente
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP



Prof. Dr. Mauro Roberto Becker
Petróleo Brasileiro S.A. - PETROBRAS



Prof. Dr. Denis José Schiozer
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Campinas, 7 de dezembro de 1999.

Dedicatória:

Dedico este trabalho aos meus pais Americo e Lucy que, mesmo à distância, sempre me incentivaram.

À minha esposa Patricia, que juntamente comigo enfrentou esta jornada.

Aos meus filhos Gustavo e Daniel, simplesmente porque eles existem.

Agradecimentos:

À Petrobras S.A. pelo suporte financeiro durante o período de mestrado e liberação dos dados necessários para execução deste trabalho.

Ao amigo e colega Eugênio Dezen, pelo empenho despendido na minha participação deste programa de mestrado e por acreditar que é através da capacitação técnica de seus funcionários, de forma contínua e responsável, que a empresa pode atingir resultados cada vez mais relevantes.

Ao professor Hung Kiang Chang, pela atenção dispensada, orientação e incentivo em todas as etapas deste trabalho.

Aos professores Denis Schiozer, Euclides Bonet, Cristina Cunha, Antônio Cláudio Corrêa e Osvaldo Vidal Trevisan, pelo apoio técnico imprescindível que prestaram.

Aos colegas da Petrobras / E&P-SEAL, Lúcio Rambo, Oscar Pessoa, Sílvio Formoso, Cláudio Borba, Gilvan Hamsi Jr., Marcelo Luvizotto, Abaeté Corrêa, Deícuro Pedrosa e Jairo Mendonça, pelas valiosas informações e preparação dos dados liberados.

Ao pessoal do Departamento de Petróleo da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP, Gisele, Fátima, Délcio e Alice, pelo apoio na área de informática, secretaria e serviço de biblioteca, durante todo o curso de mestrado.

Aos colegas de mestrado, por ajudar a tornar esta árdua jornada uma tarefa agradável. Em especial aos amigos José Pedro dos Santos e Carlos Pedroso Jr., legítimos consultores deste trabalho.

Finalmente a minha esposa e filhos, pela compreensão nas horas de ausência e a alegria das horas de lazer.

*Sabemos que o que fazemos é somente uma gota d'água no oceano.
Mas se não fizéssemos isso, esta gota faltaria.*

Madre Tereza de Calcutá

Resumo

DE GASPERI, André. *Modelagem numérica da salinização da água de formação e da migração secundária de hidrocarbonetos na Bacia de Sergipe*. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 140 p. Dissertação (Mestrado).

Neste trabalho foram modelados numericamente a salinização da água de formação e a migração secundária e acumulação dos hidrocarbonetos que preenchem os reservatórios do Membro Carmópolis, da Formação Muribeca, na Bacia de Sergipe. O modelo geológico-geoquímico que serviu de base para a modelagem numérica da salinização foi reproduzido utilizando um simulador de difusão iônica construído para este fim. A simulação considerou a infiltração de água meteórica em porções localizadas nas bordas da bacia, a dissolução de sal da unidade sobreposta e a difusão iônica lateral, como os principais processos controladores da salinização da água de formação. A modelagem da migração secundária e acumulação de hidrocarbonetos na área foi realizada utilizando um simulador de escoamento comercial. A simulação exigiu duas fontes distintas de hidrocarbonetos, configurando duas rotas de migração. Este processo ocorreu inicialmente por migração vertical, através de zona de falha, seguido por deslocamento lateral focalizado, através das rochas carreadoras, até o óleo acumular nas estruturas ou escapar para superfície, nas bordas da bacia.

Palavras Chave:

- Difusão iônica
- Salinização
- Água de formação
- Migração secundária

Abstract

DE GASPERI, André. *Numerical modelling of formation water salinity and secondary migration of hydrocarbon in Sergipe Basin*. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 140 p. Dissertação (Mestrado).

In the present study, formation water salinity and secondary migration and accumulation of hydrocarbon in reservoir rocks of Carmópolis Member, Muribeca Formation, were numerically modelled. The geologic-geochemical model of formation water salinity evolution was successfully modelled using an ionic diffusion simulator developed for the present work. The model considered meteoric water infiltration in the basin borders, dissolution of overlying salt beds and lateral ionic diffusion. Secondary migration and accumulation in the study area were modelled using a commercial flow simulator, which required two hydrocarbon sources and two distinct migration pathways. This process occurred initially by vertical migration of hydrocarbon through fault zone, followed by focused lateral migration in the carrier beds, reaching the traps or seeping to the surface.

Key words:

- Ionic diffusion
- Salinity
- Formation water
- Secondary migration

Índice

Lista de Figuras.....	xii
Lista de Tabelas.....	xix
Nomenclatura.....	xx
1- Introdução.....	1
1.1- Justificativa.....	1
1.2- Motivação e Objetivos.....	4
1.3- Conteúdo.....	4
2- Conceitos Fundamentais.....	7
2.1- Sistemas Termodinâmicos.....	7
2.2- Difusão nos Sedimentos.....	11
3- Modelo Geológico de Salinização.....	17
3.1- Aspectos Geológicos do Membro Carmópolis.....	17
3.2- Mapeamento de Salinidade.....	22
3.3- Caracterização Hidrogeoquímica.....	26
3.4- Modelo de Salinização.....	34
3.5- Interpretação Hidrogeológica.....	39

4- Simulador de Difusão Iônica.....	41
4.1- Resolução Numérica da Equação da Difusão.....	41
4.2- Modelo de Simulação.....	49
4.3- Características e Lógica do Simulador.....	50
4.4- Limitações do Simulador.....	57
4.5- Validação do Simulador.....	57
5- Modelagem Numérica da Salinização da Água de Formação.....	61
5.1- Considerações Sobre as Condições Iniciais e de Contorno.....	61
5.2- Considerações Sobre o Coeficiente de Difusão.....	62
5.3- Simulação Unidimensional.....	65
5.4- Simulação Tridimensional.....	69
6- Modelagem Numérica da Migração Secundária de Hidrocarbonetos.....	85
6.1- O Sistema Petrolífero da Bacia de Sergipe.....	86
6.2- O Simulador de Escoamento.....	87
6.3- Elaboração do Modelo Numérico.....	88
6.4- Controle Numérico.....	103
6.5- Resultados Obtidos.....	104
6.6- Análise dos Resultados.....	112
6.7- Modelo de Migração com Dois Bancos de Óleo.....	113
6.8- Comentários Adicionais Sobre o Modelo Numérico.....	119
7- Conclusões e Recomendações.....	123
7.1- Conclusões.....	123
7.2- Recomendações.....	125

Referências Bibliográficas.....	127
Apêndices.....	135
A- Resolução Analítica da Equação da Difusão Iônica.....	135

Lista de Figuras

2.1-	Desenho esquemático do fluxo de calor e do gradiente de temperatura em uma barra metálica no estado permanente	9
2.2-	Desenho esquemático dos gradientes de temperatura em uma barra metálica nos estados permanente, transiente e de equilíbrio	10
3.1-	Mapa de localização do Membro Carmópolis, campos de petróleo e seções geológicas	18
3.2-	Posição do Membro Carmópolis na Coluna Estratigráfica da Bacia de Sergipe	19
3.3-	Diagrama esquemático do sistema deposicional do Membro Carmópolis	20
3.4-	Mapa de isólitais de anidrita do Membro Ibura	21
3.5-	Mapa de isólitais de sais solúveis do Membro Ibura	22
3.6-	Mapa de isossalidade da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis	23
3.7-	Seção Geológica 1	24
3.8-	Seção Geológica 2	25
3.9-	Gráfico de salinidade <i>versus</i> distância a partir de um corpo de sal	26
3.10-	Mapa de caracterização hidrogeoquímica do Membro Carmópolis	28
3.11-	Exemplo de Diagrama de Stiff	29
3.12-	Diagramas de Stiff característicos da água do Membro Carmópolis	29

3.13-	Gráfico da razão Na/Cl <i>versus</i> cota	31
3.14-	Gráfico de bicarbonato <i>versus</i> cota	32
3.15-	Gráfico de sulfato <i>versus</i> cota	32
3.16-	Gráfico sódio <i>versus</i> cloro	32
3.17-	Gráfico de sulfato <i>versus</i> bário	33
3.18-	Gráfico da razão Mg/Ca <i>versus</i> cota	33
3.19-	Seção geológica baseada em dados sísmicos e de subsuperfície	35
3.20-	Gráfico de Rittenhouse	37
4.1-	Desenho ilustrativo do cálculo da concentração no tempo e no espaço através do método explícito, em um modelo unidimensional	48
4.2-	Desenho ilustrativo do cálculo da concentração no tempo e no espaço através do método explícito, em um modelo bidimensional	48
4.3-	Exemplo de <i>Matriz Status</i> e <i>Matriz de Condições Iniciais</i>	49
4.4-	Desenho esquemático da possibilidade de vizinhanças entre células de cálculo e células nulas em um modelo bidimensional	52
4.5-	Visualização da variação da concentração em gráficos de superfície do aplicativo <i>Excel™</i>	54
4.6-	Visualização da variação da concentração em gráficos de superfície 3D do aplicativo <i>Excel™</i>	54
4.7-	Visualização da variação da concentração em mapa gerado através do aplicativo <i>Surfer™</i>	55

4.8-	Visualização da variação da concentração em uma saída do pós-processador <i>Results 3D™</i>	55
4.9-	Exemplo de saída de dados da opção de balanço de massa do simulador de difusão iônica	56
4.10-	Gráfico de concentração <i>versus</i> distância confrontando os resultados obtidos analítica e numericamente	58
4.11-	Fluxograma do simulador de difusão iônica	59
5.1-	Gráfico do fator de formação <i>versus</i> porosidade do reservatório Carmópolis	63
5.2-	Gradiente geotérmico médio na área de ocorrência do Membro Carmópolis	64
5.3-	Variação linear do coeficiente de difusão do íon cloreto com a temperatura	64
5.4-	Perfil de difusão iônica simulado para uma área de borda da bacia, considerando condições iniciais e de contorno coerentes com o modelo geológico de salinização	66
5.5-	Perfil de difusão iônica simulado para uma área de borda da bacia, considerando uma condição de contorno externo incompatível com o modelo de salinização	66
5.6-	Perfil de difusão iônica simulado para uma área no interior da bacia, considerando uma concentração inicial de 0 g/L, incompatível com o modelo de salinização	67
5.7-	Perfis de difusão iônica simulados para uma área no interior da bacia, considerando diferentes condições iniciais, após decorridos 114 Ma	68
5.8-	Perfil de difusão iônica simulado para uma área no interior da bacia, considerando uma concentração inicial de 100 g/L	68
5.9-	Figura ilustrativa da orientação da malha preparada para simulação tridimensional da salinização	70

5.10-	Desenho esquemático do artifício geométrico elaborado nas <i>camadas fonte</i> para propiciar uma área de difusão compatível com a área de contato sal-reservatório	71
5.11-	Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 1 e detalhe da seção xz17	72
5.12-	Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 2 e detalhe da seção xz17	72
5.13-	Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 3 e detalhe da seção xz17	73
5.14-	Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 10 Ma do início do processo	74
5.15-	Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 30 Ma do início do processo	75
5.16-	Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 60 Ma do início do processo	75
5.17-	Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 90 Ma do início do processo	76
5.18-	Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 114 Ma do início do processo	76
5.19-	Mapa de salinidade simulado para o tempo atual	77
5.20-	Mapa de salinidade medido	78
5.21-	Mapa residual, evidenciando a diferença entre a salinidade mapeada e simulada	78
5.22-	Gráfico de evolução da concentração média da água de formação ao longo do tempo geológico	81

5.23-	Mapa de salinidade simulado para a camada 2, em um modelo de 7 camadas com concentração inicial de 0,1 g/L, decorridos 114 Ma do início do processo	82
6.1-	Mapa de ocorrência dos tipos de óleos e extratos orgânicos na Bacia de Sergipe	87
6.2-	Histograma de isólitas do Membro Carmópolis	89
6.3-	Mapa de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha <i>corner point</i>	90
6.4-	Mapa tridimensional de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha <i>corner point</i>	91
6.5-	Desenho esquemático da metodologia adotada para o cálculo do valor de <i>netgross</i>	92
6.6-	Mapa de <i>netgross</i> e área de ocorrência da camada 1	93
6.7-	Mapa de <i>netgross</i> e área de ocorrência da camada 2	93
6.8-	Mapa de <i>netgross</i> e área de ocorrência da camada 3	94
6.9-	Mapa de <i>netgross</i> e área de ocorrência da camada 4	94
6.10-	Desenho esquemático do método usado para elaborar a geometria da zona de falha	95
6.11-	Relação espessura/rejeito de zonas de falha	96
6.12-	Mapa de topo com o posicionamento da falha e do banco de óleo	96
6.13-	Seções perpendiculares a zona de falha	97
6.14-	Seções paralelas a zona de falha	98
6.15-	Anisotropia de permeabilidade em uma zona de bandas de deformação e planos de deslizamento	99
6.16-	Gráfico de permeabilidade relativa do sistema óleo-água	103

6.17-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo no tempo zero	104
6.18-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,1 Ma	105
6.19-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,4 Ma	105
6.20-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,7 Ma	106
6.21-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorrido 1,0 Ma	106
6.22-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,4 Ma	107
6.23-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,8 Ma	107
6.24-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 2,4 Ma	108
6.25-	Seções evolutivas do preenchimento do Campo A	109
6.26-	Seções evolutivas do preenchimento do Campo B	110
6.27-	Seções evolutivas do preenchimento do Campo C	111
6.28-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo no tempo zero	114
6.29-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,1 Ma	114
6.30-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,2 Ma	115
6.31-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,4 Ma	115
6.32-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,8 Ma	116
6.33-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,2 Ma	116
6.34-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,8 Ma	117
6.35-	Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 2,4 Ma	117
6.36-	Seções evolutivas do preenchimento do Campo D	118

6.37-	Mapa de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha variável	119
6.38-	Mapa tridimensional de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha variável	120

Lista de Tabelas

3.1-	Tipos genéticos e respectivos limites de razões de teores de íons segundo a Classificação de Sulin	27
5.1-	Especiação do NaCl dissolvido na água, na concentração de saturação com halita, calculado através do aplicativo <i>Solmineq88</i>	62
5.2-	Dados de concentração média da água de formação e volume de halita dissolvida ao longo do tempo geológico	81
6.1-	Dados de entrada do programa PVT	100
6.2-	Propriedades do óleo utilizadas na simulação numérica	101
6.3-	Propriedades da água utilizadas na simulação numérica	101
6.4-	Dados de permeabilidade relativa do sistema óleo-água utilizados na simulação	102
6.5-	Tempos de processamento de cada modelo e equipamentos utilizados	121

Nomenclatura

Letras Latinas

<i>Ab</i>	Área da base	
<i>Al</i>	Área lateral	
<i>Bo</i>	Fator volume de formação do óleo	m^3/m^3
<i>Bw</i>	Fator volume de formação da água	m^3/m^3
<i>C</i>	Concentração	g/L
<i>C_D</i>	Concentração adimensional	
<i>C_w</i>	Compressibilidade da água	cm^2/kgf
<i>dl</i>	Distância real do caminho tortuoso no meio poroso	
<i>dx</i>	Distância em linha reta no meio poroso	
<i>D</i>	Coefficiente de difusão no meio aquoso	
<i>D_s</i>	Coefficiente de difusão no meio poroso	cm^2/s
<i>D_x</i>	Coefficiente de difusão na direção <i>x</i>	
<i>D_y</i>	Coefficiente de difusão na direção <i>y</i>	
<i>D_z</i>	Coefficiente de difusão na direção <i>z</i>	
<i>erfc</i>	Função erro complementar	
<i>FF</i>	Fator de formação	adimensional
<i>GG</i>	Gradiente geotérmico	$^{\circ}C/km$
<i>h</i>	Incremento ou variação no espaço nas direções <i>x</i> e <i>y</i>	
<i>hz</i>	Incremento ou variação no espaço na direção <i>z</i>	
<i>i, j, k</i>	Direções <i>x, y</i> e <i>z</i> , respectivamente, no simulador de escoamento	
<i>J</i>	Fluxo de difusão	
<i>kn</i>	Permeabilidade perpendicular à zona de falha	mD

k_p	Permeabilidade paralela à zona de falha	mD
k_{row}	Permeabilidade relativa ao óleo no sistema óleo-água	adimensional
k_{rw}	Permeabilidade relativa à água	adimensional
P	Pressão	kgf/cm ²
P_b	Pressão de bolha	kgf/cm ²
R_s	Razão de solubilidade	m ³ /m ³
R_{si}	Razão de solubilidade inicial	m ³ /m ³
S_o	Saturação de óleo	%
S_{or}	Saturação de óleo residual	%
S_w	Saturação de água	%
t	Tempo	
t_D	Tempo adimensional	
T	Temperatura	
T_e	Temperatura de equilíbrio	
T_x	Temperatura na posição x	
x	Posição no espaço na direção x (horizontal)	m, km
X_D	Espaço adimensional	
y	Posição no espaço na direção y (horizontal)	m, km
z	Posição no espaço na direção z (vertical)	m, km

Letras Gregas

Δt	Incremento ou variação no tempo (<i>time step</i>)	
Δx	Incremento ou variação no espaço na direção x	
Δy	Incremento ou variação no espaço na direção y	
Δz	Incremento ou variação no espaço na direção z	
θ	Tortuosidade	adimensional
λ	Condição de convergência do método explícito	
μ_o	Viscosidade do óleo morto	cp
μ_w	Viscosidade da água	cp

ρ_g	Densidade do gás	ar =1
ρ_o	Densidade do óleo	°API
ρ_w	Densidade da água	g/cm ³
ϕ	Porosidade	%

Superescritos

k Tempo k

Subscritos

D Variável adimensional
 g Gás
 i Componente i
 i Espaço i correspondente a direção x
 j Espaço j correspondente a direção y
 m Espaço m correspondente a direção z
 o Óleo
 w Água

Abreviaturas

BS Bicarbonato-sódico
CC Cloreto-cálcico
CM Cloreto-magnésiano
IT Índice de transformação
Ma Unidade de tempo geológico (Mega anos)
SS Sulfato-sódico
TSD Teor de sólidos dissolvidos
vois Volume de óleo *in situ*

Siglas

CMG	<i>Computer Modeling Group</i>
EUA	Estados Unidos da América
MUR/CPS	Formação Muribeca / Membro Carmópolis
MUR/OIT	Formação Muribeca / Membro Oiteirinhos
PDO	Formação Penedo
RN	Rio Grande do Norte
RPT	Formação Rio Pitanga
SER	Formação Serraria
SPA	Sedimentos de praia e aluvião

Capítulo 1

Introdução

1.1 - Justificativa

A água de formação, via de regra, pode ser considerada o primeiro fluido a preencher o espaço poroso dos depósitos sedimentares. Os constituintes iônicos que determinam a salinidade inicial da água são função do ambiente deposicional, no qual o sedimento foi depositado, e da composição mineralógica dos sedimentos. Com o passar do tempo geológico e da transformação dos sedimentos em rocha sedimentar, através da diagênese, a composição iônica da água conata (água do ambiente sedimentar) sofre transformações decorrentes da interação rocha-fluido. Este processo é controlado pelas condições de pressão e temperatura, e tende a manter o equilíbrio termodinâmico entre as espécies iônicas dissolvidas na água e as fases mineralógicas que compõem a rocha. Contudo, a salinização intensa da água de formação, que normalmente é verificada nas bacias sedimentares mais antigas, é causada principalmente pela abundância do íon cloreto (Cl⁻). O cloro é um elemento que apresenta um comportamento conservativo na água de formação, uma vez que não entra na estrutura dos principais minerais que constituem as rochas sedimentares. A sua presença em abundância na água de formação está relacionada a sedimentos de origem marinha, devido ao alto teor deste elemento na água do mar, ou a proximidade dos aquíferos a depósitos evaporíticos constituídos por sais solúveis, como a halita (NaCl), que é passível de dissolução em subsuperfície.

Segundo Hanor (1987), a concentração de cloreto e de qualquer outra espécie dissolvida nas águas de formação pode ser resultado da atuação de um ou mais processos, sendo os principais agentes controladores da salinização, a concentração inicial da água singenética, o efeito da interação água-rocha (envolve a dissolução e precipitação de sais), o efeito da mistura de águas de diferentes concentrações e o transporte diferencial (envolve difusão iônica e membrana de filtração). Contudo, de todos os processos, a dissolução em subsuperfície de sais de cloro é considerado o mais eficiente para explicar elevações substanciais na salinidade da água de formação. Mesmo em bacias com ausência da seqüência evaporítica mais solúvel, admite-se que a salinização das águas teria origem em sais pretéritos, que estariam hoje completamente dissolvidos. Do exposto, conclui-se que a salinização da água de formação pode ocorrer continuamente ao longo do tempo geológico.

A migração secundária de hidrocarbonetos por sua vez, tem início em uma rocha geradora localizada em subsuperfície, a partir do momento em que esta atinge o pico de geração. Neste momento, os hidrocarbonetos alcançam os aquíferos e tendem a migrar por flutuação e por forças capilares, até serem aprisionados em uma estrutura. Quando o óleo é trapeado, uma parcela da água de formação fica retida juntamente com o óleo na forma de água irredutível. Neste instante, os processos diagenéticos que envolvem interações rocha-fluido tendem a cessar, bem como a salinização da água irredutível, ao contrário da água do aquífero, que pode continuar evoluindo (salinizando).

A proposta deste trabalho é modelar numericamente, em três dimensões, a salinização da água de formação e a migração secundária de hidrocarbonetos no Membro Carmópolis, da Formação Muribeca, na Bacia de Sergipe. Embora estes dois processos ocorram de forma independente na natureza, eles podem estar sobrepostos no tempo, conforme comentado anteriormente.

Na literatura, mesmo de forma individualizada, poucos exemplos têm sido reportados a este respeito. Ranganathan (1991) apresentou um artigo onde ele quantifica o volume de halita removido através de difusão de sal na água intersticial de sedimentos Terciários (5,3 Ma) da Bacia do Mar Vermelho e também em rochas do Cambriano (530 Ma) da Bacia de Illinois. No

primeiro exemplo as condições de contorno eram evidentes, devido a presença de sais solúveis no registro sedimentar, enquanto que no segundo, as condições foram inferidas em função da ausência de sal solúvel, no presente. Em ambos os casos os processos foram modelados em uma dimensão, na vertical.

Em relação à migração secundária de hidrocarbonetos, Souto Filho (1994) mostrou a eficiência dos simuladores de escoamento, ferramenta amplamente utilizada nas atividades de gerenciamento de reservatórios, na reprodução deste processo. Souto Filho (*op. cit.*) trabalhou tanto na escala regional, onde modelou a migração secundária em duas e três dimensões, na Formação Açu da Bacia Potiguar (RN), como também na escala de campo de petróleo. Neste último caso, teve o objetivo de avaliar o impacto das heterogeneidades das rochas carreadoras na acumulação do Campo de Alto do Rodrigues (Bacia Potiguar).

Do ponto de vista prático, alguns aspectos importantes relacionados ao tema são:

- A incerteza associada à utilização da resistividade da água de formação do aquífero para o cálculo da saturação de óleo através de perfis elétricos, uma vez que a parcela da resistividade medida na zona de óleo relativa a água é devida a água irreduzível e não a água do aquífero. A este respeito, Coleman (1992) mostrou, para um determinado campo de petróleo do Mar do Norte, que a água trapeada com o óleo apresentava uma salinidade de aproximadamente 25 g/L, enquanto a água de formação continha 60 g/L, o que acarretava em um cálculo de volume de óleo superestimado em 10%.
- A evolução da salinidade da água pode ser decisiva na preservação de uma jazida de hidrocarbonetos, tendo em vista que a salinidade é um dos principais fatores que inibem a atuação das bactérias aeróbicas e a conseqüente biodegradação do óleo. Alguns autores (Philippi, 1977; Barker, 1980; *apud* Connan, 1984) reportaram que drásticas biodegradações são geralmente observadas em reservatórios percolados por água meteórica (com alto teor de sulfato e baixa salinidade).

- A simulação da migração secundária na escala de bacia permite, conforme mostrado por Souto Filho (*op. cit.*), avaliar as rotas de migração de óleo, quantificar as velocidades de deslocamento da frente de migração, determinar o tempo de chegada do óleo nas áreas favoráveis a acumulação, definir os principais fatores que condicionam a migração secundária e também identificar os prováveis locais de escape de óleo para superfície.

1.2 - Motivação e Objetivos

A principal motivação deste trabalho é a utilização de métodos numéricos, consagradamente utilizados nas áreas de ciências e engenharia, na quantificação de problemas de cunho geológico. Mais especificamente, podemos citar a resolução numérica da equação da difusão iônica, que é um processo reconhecidamente efetivo ao longo do tempo geológico.

O objetivo do estudo é testar/reproduzir numericamente os modelos geológico-geoquímicos de salinização da água de formação e de migração secundária de hidrocarbonetos, com a finalidade de reconstituir a história evolutiva dos fluidos que preencheram os reservatórios de petróleo ao longo do tempo geológico.

1.3 – Conteúdo

O assunto abordado nesta dissertação está subdividido em sete capítulos, conforme detalhado a seguir.

No Capítulo 2 é feita uma revisão de conceitos relacionados com a difusão iônica em meios porosos e sistemas termodinâmicos. A compreensão destes tópicos é de fundamental importância para equacionar numericamente o processo de salinização da água de formação. Na seqüência, no Capítulo 3, é descrito detalhadamente o modelo geológico de salinização da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis. Este modelo, elaborado inicialmente no âmbito da Petrobras, está embasado em evidências geológicas, estruturais, diagenéticas e hidrogeoquímicas que

permitem inferir a respeito dos ambientes hidrogeológicos presentes na unidade alvo, bem como sobre os processos envolvidos na salinização da água de formação. O entendimento deste modelo proporciona a base necessária para a formulação das condições iniciais e de contorno requeridas no tratamento numérico do problema.

No Capítulo 4 é apresentado o simulador de difusão iônica construído para modelagem da salinização. Neste capítulo é dada ênfase especial ao tratamento numérico da equação diferencial que governa a difusão iônica em meios porosos e as características intrínsecas do simulador. Também são apresentadas algumas limitações do simulador e sua validação através da comparação da solução numérica com a solução analítica.

No Capítulo 5 é apresentada a modelagem numérica da salinização da água de formação. Inicialmente são feitas algumas considerações sobre as condições iniciais e de contorno esperadas e sobre o coeficiente de difusão. Na seqüência, são apresentadas e comentadas, tanto a simulação unidimensional, como a simulação em três dimensões deste processo.

O Capítulo 6 trata da modelagem numérica da migração secundária de hidrocarbonetos. Primeiramente são apresentados alguns conceitos básicos referentes a este processo e caracterizado o sistema petrolífero da Bacia de Sergipe. Posteriormente, é detalhada a metodologia empregada na elaboração do modelo de simulação e apresentados os resultados obtidos na simulação.

Finalmente, no Capítulo 7, são apresentadas as principais conclusões e recomendações deste estudo.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais

A geoquímica pode ser simplificada definida como o estudo da origem e transformação dos elementos químicos no nosso planeta. A distribuição dos elementos nos oceanos, dos gases nos vulcões, dos metais nos depósitos minerais, dos componentes orgânicos nas rochas sedimentares e também da salinidade nas águas de formação, são estudados através da geoquímica. Para descrever quantitativamente os processos geológicos, basicamente a geoquímica aplica os conhecimentos da fisico-química. A termodinâmica e a cinética são duas subdivisões da fisico-química que proporcionam as ferramentas necessárias para reconstruir as origens físicas e químicas dos sistemas geológicos. A termodinâmica é o estudo da energia e das suas transformações, permitindo saber quando um determinado processo geoquímico é possível. A cinética estuda as taxas e mecanismos de reação e nos possibilita saber quais os processos são mais rápidos (Nordstrom e Munoz, 1994).

Os fenômenos de transporte químico, como a difusão iônica, que por sua vez é objeto de estudo nesta dissertação, estão incluídos na termodinâmica.

2.1 – Sistemas Termodinâmicos

Sistemas termodinâmicos podem ser compreendidos como uma porção de matéria separada do resto do universo observável, por limites bem determinados. Os sistemas são definidos de acordo com a conveniência do observador e seus limites são escolhidos de forma a permitir ao

investigador usar a termodinâmica. Como a termodinâmica trata das propriedades macroscópicas da matéria (pressão, temperatura, viscosidade...) e de processos envolvendo troca de energia, os sistemas podem ser classificados de acordo com a possibilidade de troca de matéria e energia, através de seus limites. Desta forma, os sistemas são definidos como abertos quando permitem o fluxo de massa e energia através de seus limites; fechados quando permitem o fluxo de energia mas não de massa, adiabáticos quando são fechados para massa e permitem o fluxo de energia, exceto calor; e isolados quando não permitem o fluxo de massa nem energia. Na prática, os sistemas reais não se comportam exatamente como nenhuma das definições anteriores, sendo a experiência e os objetivos do observador que definem o sistema e suas propriedades termodinâmicas.

No nosso caso particular, onde é tratado o processo de salinização da água de formação através de difusão iônica, a variável interna do sistema é a concentração (salinidade), sendo o sistema definido em função da área de ocorrência de uma determinada unidade estratigráfica. Assim, as dimensões do sistema são da ordem de dezenas de quilômetros (escala de bacia sedimentar) e o tempo da ordem de milhões de anos (escala de tempo geológico).

2.1.1 – Estados organizacionais dos sistemas

A descrição dos processos geoquímicos através da termodinâmica requer uma noção de tempo e espaço, uma vez que as observações de um determinado ambiente geológico estão relacionadas a um específico período de tempo e a uma dimensão espacial fixa. Assim, com respeito às variações temporais, um sistema pode ser definido como dependente ou independente do tempo.

Os valores que as variáveis internas de um sistema assumem no tempo e no espaço, nos levam a definir os estados organizacionais de um sistema. Desta forma, é definido como estado de equilíbrio, quando as variáveis de um sistema são invariantes no tempo e no espaço; estado permanente (*steady state*) quando as variáveis são invariantes no tempo e variantes no espaço, e estado transiente quando as variáveis são variantes no tempo e no espaço. Os processos

dependentes do tempo estão sempre em movimento, enquanto os independentes do tempo podem ser dinâmicos, no caso do sistema permanente, ou estáticos, no caso do sistema em equilíbrio.

2.1.2 – O exemplo do calor

Um exemplo simples, que permite compreender melhor os estados organizacionais dos sistemas, é o caso da transferência de calor.

Se uma barra metálica, que apresenta boa condutividade térmica, for colocada entre dois reservatórios com temperaturas distintas (T_1 e T_2), ocorrerá fluxo de calor do reservatório mais quente (1) para o reservatório de temperatura mais baixa (2), conforme ilustrado na Figura 2.1. Assumindo que o sistema (barra metálica) é homogêneo e que os reservatórios são grandes o suficiente para manter as suas temperaturas constantes, o declínio de temperatura ao longo da barra será linear, após um determinado período de tempo. A cada ponto no espaço (x_0 a x_4) corresponderá uma temperatura (T_{x_0} a T_{x_4}) constante e independente do tempo. Sob estas condições é estabelecido um estado permanente onde ocorre uma contínua troca de energia calorífica entre o sistema e os reservatórios.

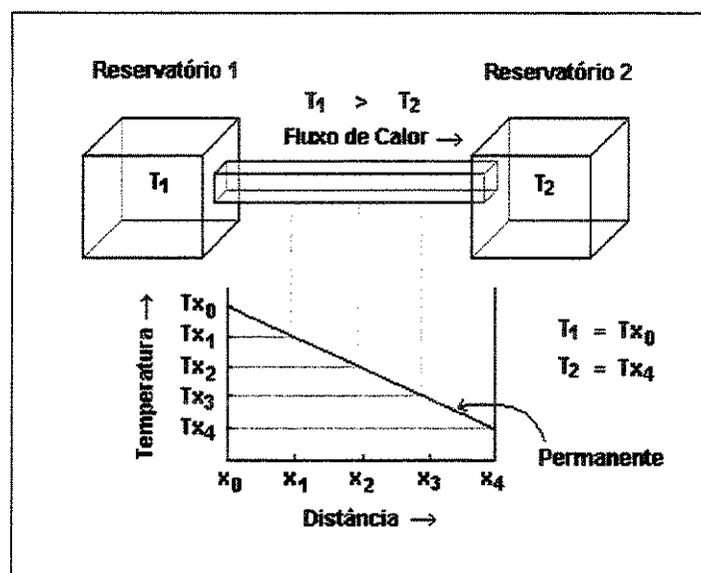


Figura 2.1: Desenho esquemático do fluxo de calor e do gradiente de temperatura em uma barra metálica no estado permanente.

Se a barra metálica for separada dos reservatórios, o estado permanente previamente estabelecido passará a um estado transiente, devido a dependência da temperatura em relação ao tempo, até a barra metálica atingir o equilíbrio térmico. Na Figura 2.2 estão representados os gradientes de temperatura do estado permanente até a temperatura de equilíbrio (T_e), passando por três gradientes instantâneos, que representam o estado transiente.

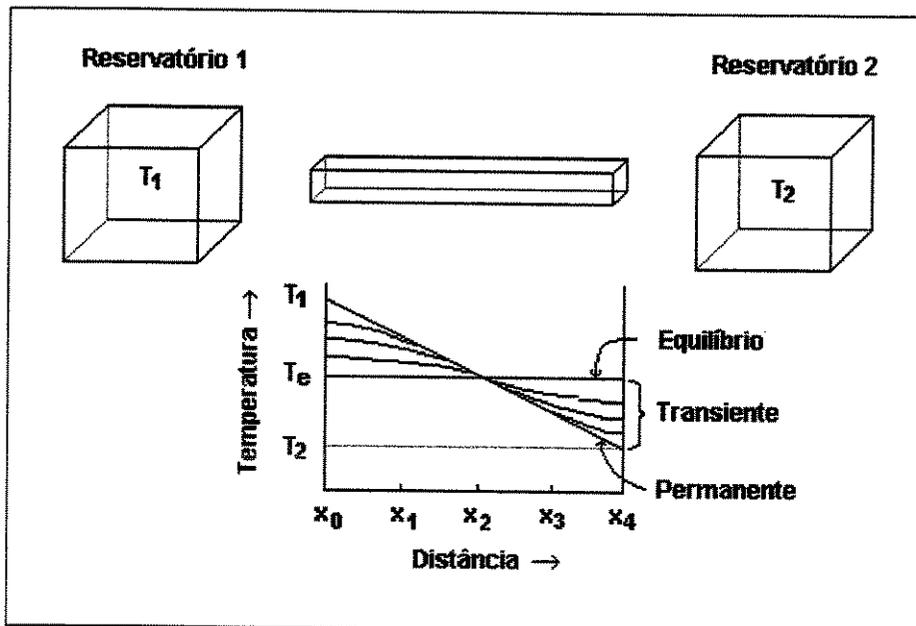


Figura 2.2: Desenho esquemático dos gradientes de temperatura em uma barra metálica nos estados permanente, transiente e de equilíbrio.

Após atingido o equilíbrio, a temperatura medida em qualquer ponto da barra não somente independe do tempo, como também é igual em todos os pontos da barra.

2.1.3 – Expressão matemática dos estados organizacionais

A descrição e definição dos vários estados organizacionais dos sistemas podem ser formulados em expressões matemáticas. Considerando a temperatura (T), dependente do tempo (t) e do espaço (x), como um exemplo de variável do sistema, tem-se:

$$T = T(t, x) \quad (2.1)$$

As derivadas no tempo e no espaço da temperatura são, portanto, diferenciais parciais, que para o caso do estado transiente assumem valores reais, diferentes de zero:

$$\left| \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_x \right| > 0 \quad \text{e} \quad \left| \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_t \right| > 0 \quad (2.2)$$

Para o estado permanente, as temperaturas variam com a posição mas não com o tempo:

$$\left| \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_x \right| = 0 \quad \text{e} \quad \left| \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_t \right| > 0 \quad (2.3)$$

e para o estado de equilíbrio, a temperatura independe do tempo e da posição:

$$\left| \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_x \right| = 0 \quad \text{e} \quad \left| \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_t \right| = 0 \quad (2.4)$$

O mesmo raciocínio utilizado para variável temperatura pode ser feito para concentração. Neste caso, as derivadas parciais da concentração no tempo e no espaço são componentes da equação da conservação e da equação do fluxo de difusão (1ª Lei de Fick), respectivamente, conforme mostrado na Seção 2.2.

2.2 – Difusão nos Sedimentos

Segundo Berner (1980), a difusão nos sedimentos pode ser dividida em quatro categorias: difusão molecular, dispersão, movimentos de ondas e correntes e bioturbação. A difusão molecular, como o nome sugere, se refere a difusão dos constituintes atômicos, como por exemplo, átomos, íons e moléculas, dentro de uma fase única. A dispersão é a difusão das

espécies dissolvidas em água de formação fluindo, processo especialmente importante quando a taxa de fluxo é significativa. Os movimentos de ondas e correntes são processos superficiais que afetam somente os sedimentos recentemente depositados e a bioturbação é a mistura de sedimentos por organismos.

No nosso caso específico, onde é modelada a salinização da água de formação em subsuperfície, o único processo difusivo importante é a difusão molecular, uma vez que é assumido um comportamento hidrostático da unidade estratigráfica estudada, ao longo do tempo geológico.

2.2.1 – Difusão iônica em meios porosos

No caso do meio poroso, a difusão molecular pode ocorrer dentro dos grãos, na sua superfície ou na água intersticial. Como nas rochas sedimentares os dois primeiros processos são negligenciáveis comparados com o terceiro (Turk, 1976; McDuff e Gieskes, 1976; *apud* Berner, *op. cit.*), o termo difusão será aplicado no sentido de difusão molecular na água intersticial, mais especificamente, de difusão de íons, uma vez que estas são as principais espécies a sofrerem migração em um processo difusivo.

Para uma melhor compreensão da difusão iônica, voltamos a analogia com o caso da transferência de calor. Assim, como a difusão de calor é a energia que flui em um sistema em resposta à diferença de temperatura entre dois pontos, a difusão iônica constitui-se de íons que fluem em um sistema devido a diferença de concentração. Desta forma, a difusão iônica pode ser definida como um processo espontâneo de transporte de massa, em um sistema físico-químico, por efeito de gradientes de concentração.

A equação que descreve a difusão iônica em soluções aquosas é derivada das leis da difusão de Fick (Crank, 1975; *apud* Berner, *op. cit.*), que experimentalmente definiu o fluxo de difusão (1ª lei) como:

$$J_i = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (2.5)$$

onde:

J_i – fluxo de difusão do componente i , em massa por unidade de área, por tempo	[M/L ² T]
D_i – coeficiente de difusão do componente i , em área por unidade de tempo	[L ² /T]
C_i – concentração do componente i , em massa por unidade de volume	[M/L ³]
x – direção com gradiente de concentração máximo	[L]

Aplicando a equação da conservação

$$\frac{\partial J_i}{\partial x} + \frac{\partial C_i}{\partial t} = 0 \quad (2.6)$$

chega-se a 2ª lei de Fick, que é expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right)}{\partial x} \quad (2.7)$$

Para coeficiente de difusão constante, a forma unidimensional da equação da difusão torna-se:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} \quad (2.8)$$

No nosso caso particular, onde o sistema apresenta dimensões regionais e se faz necessário a resolução numérica em pelo menos duas dimensões, a equação da difusão assume uma expressão mais extensa. A formulação para um meio tridimensional, heterogêneo e anisotrópico na vertical (direção z) da equação da difusão é dada por:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(D_{z_i} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right)}{\partial z} \quad (2.9)$$

cuja forma discretizada está desenvolvida no Capítulo 4.

Na realidade, a equação derivada das leis de Fick é aplicável para espécies não carregadas. No caso das espécies carregadas, que constituem a maioria das espécies que sofrem difusão na água dos poros, a migração de um determinado íon é causada não somente pelo seu próprio gradiente de concentração, mas também pelos gradientes de potencial elétrico determinados pelos gradientes de concentração de outros íons (Anderson e Graf, 1978). Como as soluções naturais contém muitos íons diferentes, estes efeitos elétricos podem ser apreciáveis, tornando-se necessário corrigi-los. McDuff e Ellis (1979) propuseram uma equação, assumindo soluções infinitamente diluídas e coeficientes de atividade constantes, que permite calcular o coeficiente de difusão corrigido para os efeitos elétricos.

Um outro efeito inter-íons que afeta o coeficiente de difusão é advindo da formação de íons-par. Quando refere-se a difusão de um determinado íon em solução na água de formação, considera-se a soma de todas as espécies principais contendo o elemento de interesse. No caso do íon cloreto, além da forma de íon livre (Cl^-), o cloreto ocorre na forma de íons-par, como o NaCl° e KCl° . Lagasa (1979) propôs uma equação ainda mais complexa que a de McDuff e Ellis para corrigir os efeitos dos íons-par no coeficiente de difusão.

Embora os efeitos de íon-par e de interações elétricas possam ser apreciáveis para algumas espécies, para a maioria dos íons presentes na água de formação, são desprezíveis quando comparados com a redução na difusão causada pela tortuosidade do meio poroso. No nosso caso particular, estes efeitos são negligenciados e a Equação diferencial 2.9 é tratada como linear (coeficiente de difusão independente da concentração).

A tortuosidade, por sua vez, resulta da presença das partículas sólidas da rocha que fazem com que os íons percorram um caminho sinuoso, através do meio poroso, ao invés de uma linha reta, como ocorre no caso do meio aquoso. Do ponto de vista matemático, é definida como a razão entre o comprimento real percorrido pelo íon e o caminho em linha reta,

$$\theta = \frac{dl}{dx} \quad (2.10)$$

onde:

θ – tortuosidade	[adimensional]
dl – distância real do caminho tortuoso	[L]
dx – distância em linha reta	[L]

Considerando que o caminho sinuoso é sempre maior ou igual ao caminho em linha reta, a tortuosidade do meio poroso será sempre maior ou igual a unidade. Assim, o coeficiente de difusão do sedimento em termos de tortuosidade fica expresso da seguinte forma:

$$Ds_i = \frac{D_i}{\theta^2} \quad (2.11)$$

onde:

Ds_i – coeficiente de difusão do componente i , no meio poroso

Capítulo 3

Modelo Geológico de Salinização

A proposta deste capítulo é apresentar o modelo geológico-geoquímico de salinização da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis, Bacia de Sergipe. Este modelo, elaborado no âmbito da Petrobras (De Gasperi, 1996), proporciona a base necessária para a formulação das condições iniciais e de contorno requeridas na modelagem numérica da salinização da água de formação. Para sua elaboração foi realizado um estudo multidisciplinar, com base na observação de diversas características de natureza geológica, que permitem concluir a respeito dos ambientes hidrogeológicos presentes nesta unidade, bem como sobre os processos envolvidos na salinização da água de formação. Basicamente, foram integradas informações referentes ao modelo deposicional do Membro Carmópolis, a sua relação espacial com as unidades adjacentes, a evolução diagenética e as características hidrogeoquímicas.

3.1 – Aspectos Geológicos do Membro Carmópolis

3.1.1 – Localização

O Membro Carmópolis encontra-se localizado em sua maior parte na porção emersa da Bacia de Sergipe, estendendo-se para Leste, na plataforma continental, no máximo até as imediações da linha de charneira. Para Sul e Oeste esta unidade é limitada pela borda da bacia e ao Norte pelo Alto de Japoatã, onde imagina-se ter ocorrido uma região elevada na época de sua deposição. Em porções isoladas, junto aos Campos de petróleo B e D, ocorrem duas áreas onde

esta unidade está ausente, provavelmente por não-deposição, uma vez que estas regiões constituíam altos internos do embasamento (Figura 3.1).

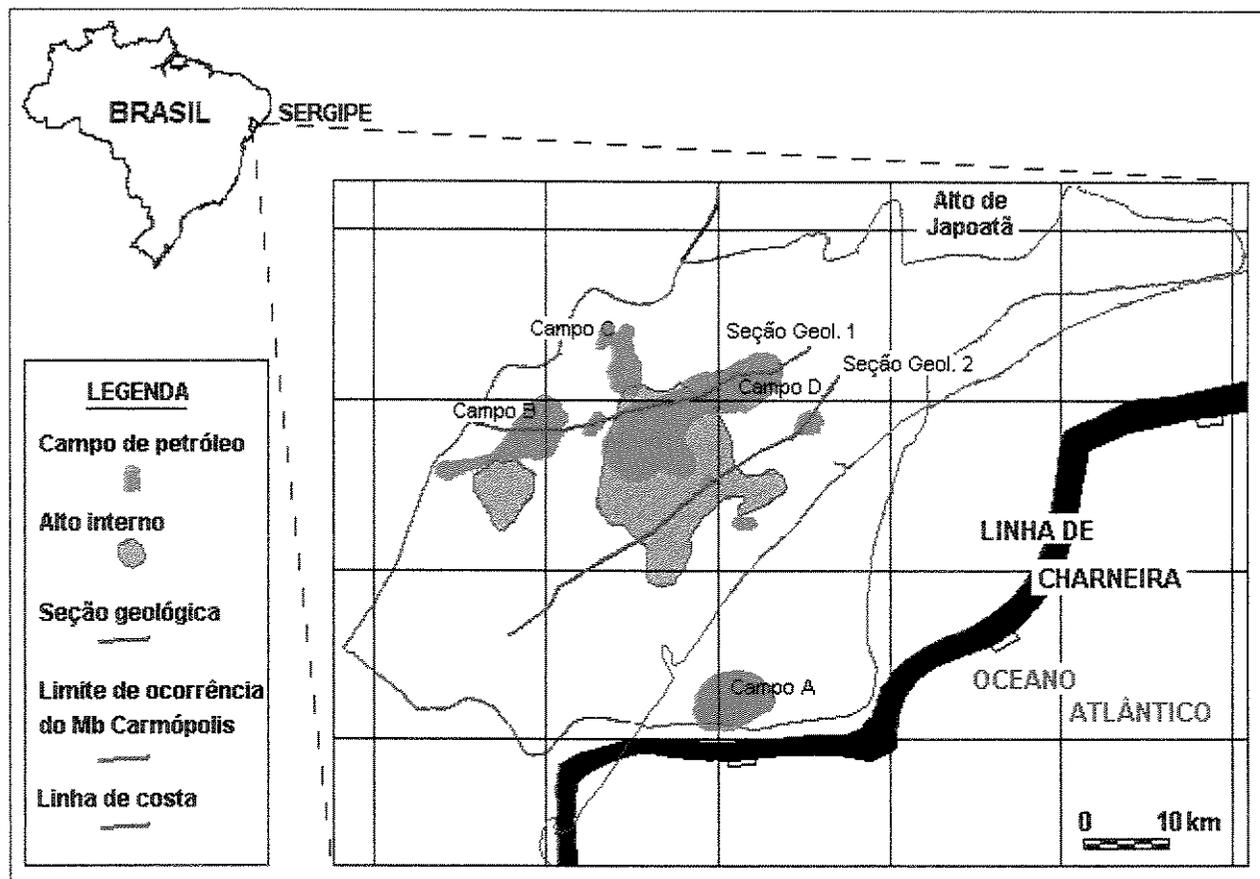


Figura 3.1: Mapa de localização do Membro Carmópolis, campos de petróleo e seções geológicas.

3.1.2 – Modelo deposicional

O Membro Carmópolis da Formação Muribeca é constituído basicamente por arenitos, folhelhos e conglomerados que preencheram paleovales esculpidos durante a discordância pré-neoalagoas. Os sedimentos que deram origem a esta unidade foram depositados em uma fase transicional, entre os estágios rifte e de oceano aberto, do processo evolutivo da margem continental brasileira e chegam a atingir espessuras de aproximadamente 200 m. A sua idade é estimada em 117 Ma (Aptiano), segundo datação palinológica (Figura 3.2).

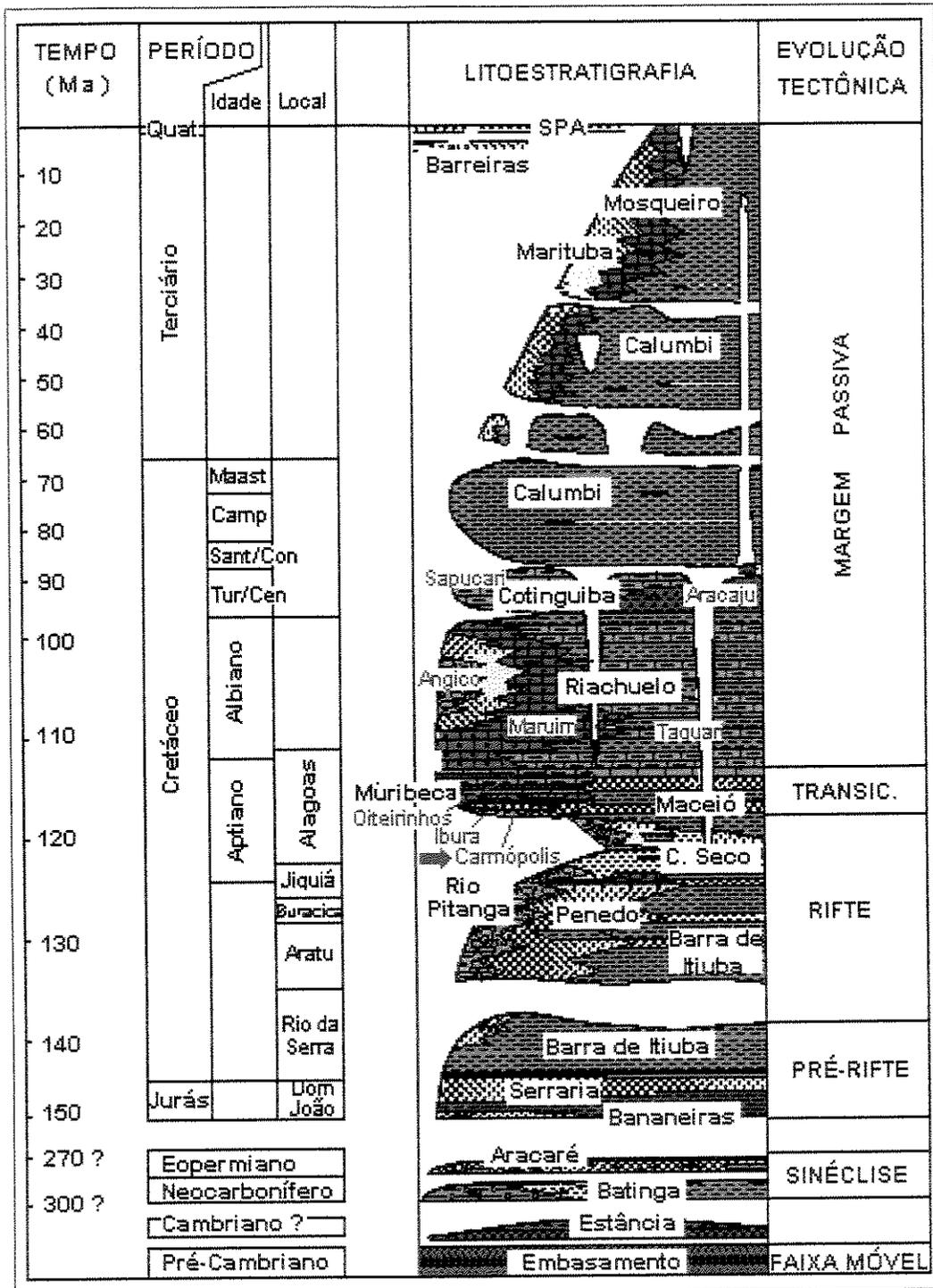


Figura 3.2: Posição do Membro Carmópolis na Coluna Estratigráfica da Bacia de Sergipe (adaptado de Feijó, 1994). Na Litoestratigrafia o nome das formações está escrito em preto e dos membros em azul.

O ambiente sedimentar característico do Carmópolis, segundo vários autores (Azambuja Filho *et al.*, 1980; Brown *et al.*, 1981; Abreu *et al.*, 1982; Candido e Wardlaw, 1985; Souza, 1989; *apud* Souza, 1995), oscila entre leques aluviais e leques deltáicos, o que é atribuído à variação periódica do nível de base do lago rift (Figura 3.3). Esta alternância entre ambientes continentais e marinhos tem uma forte implicação no modelo de salinização uma vez que permite concluir a respeito da salinidade inicial da água de formação.

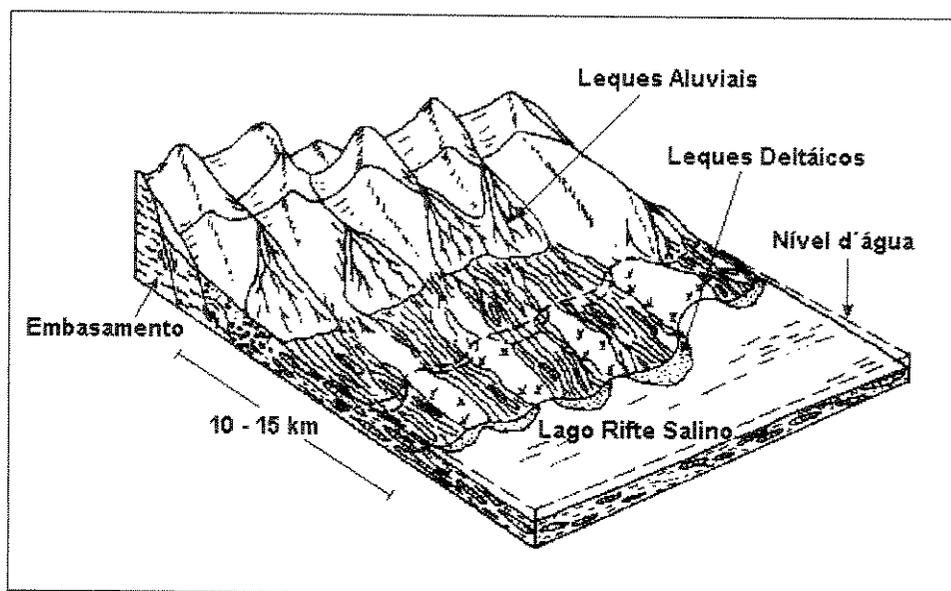


Figura 3.3: Diagrama esquemático do sistema deposicional do Membro Carmópolis (adaptado de Souza, 1995).

3.1.3 – Unidades adjacentes

As unidades adjacentes ao Membro Carmópolis são o Membro Ibura, situado imediatamente acima, e as unidades da fase rift e o embasamento cristalino, localizadas abaixo. As unidades da fase rift encontram-se confinadas em *grabens* como os do Baixo de Divina Pastora, Santa Rosa de Lima e Degrau de Pirambu-Carmópolis (vide Seções Geológicas 1 e 2 – Figuras 3.7 e 3.8), enquanto o Membro Ibura recobre praticamente toda área de ocorrência do Membro Carmópolis, freqüentemente, estando justaposto a este através de zonas de falha. Dada a sua importância para o modelo de salinização, detalhou-se um pouco mais esta unidade.

O Membro Ibura é uma unidade característica de ambiente marinho evaporítico, sendo constituído basicamente por folhelhos e calcários intercalados com camadas de anidrita e, em porções mais localizadas, sais solúveis. Sua idade é estimada em aproximadamente 114 Ma. A anidrita (CaSO_4) é um mineral resultante da desidratação térmica do gipso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) em subsuperfície, que por sua vez é precipitada diretamente nos depósitos evaporíticos. Dada a sua solubilidade relativamente baixa, ela geralmente é preservada no registro sedimentar, permitindo, através da sua área de ocorrência, inferir a respeito da extensão do ambiente evaporítico no passado. Os sais solúveis, além de serem facilmente removidos por dissolução, apresentam um comportamento dúctil, o que proporciona o seu deslocamento em relação à posição original onde foram precipitados. No Membro Ibura, os sais solúveis são constituídos predominantemente por halita (NaCl), embora também ocorram outras espécies, como: silvita (KCl), taquidrita ($\text{CaMg}_2\text{Cl}_6 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$) e carnalita ($\text{KMgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$).

Nas Figuras 3.4 e 3.5 são apresentados os mapas de isólitais de anidrita e de sais solúveis do Membro Ibura, respectivamente.

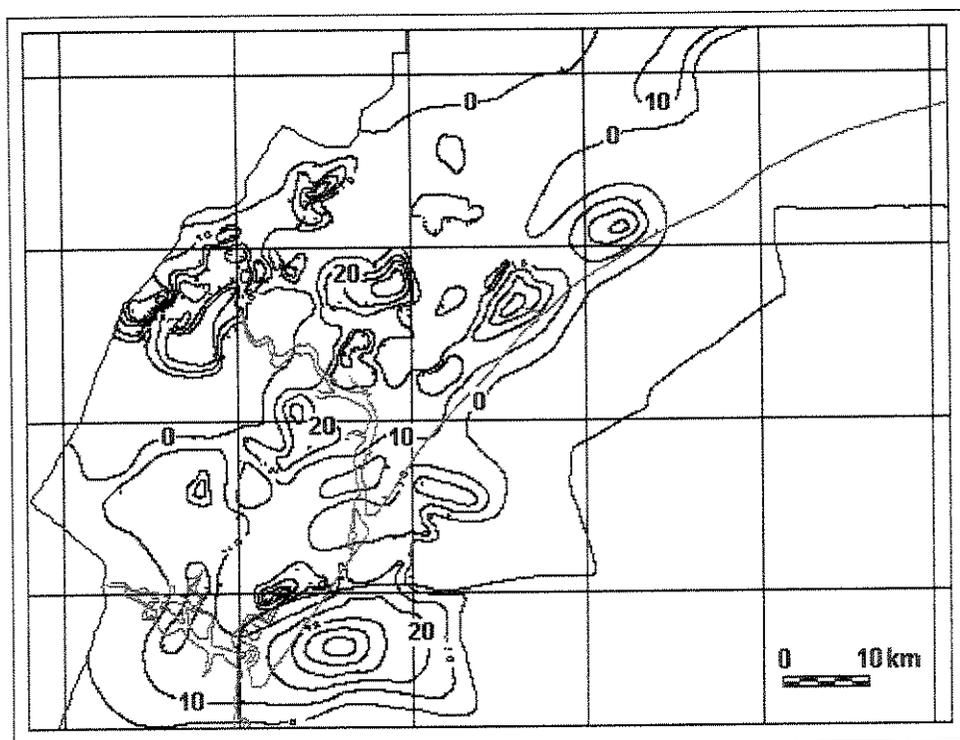


Figura 3.4: Mapa de isólitais de anidrita do Membro Ibura (Intervalo de contorno = 10 m).

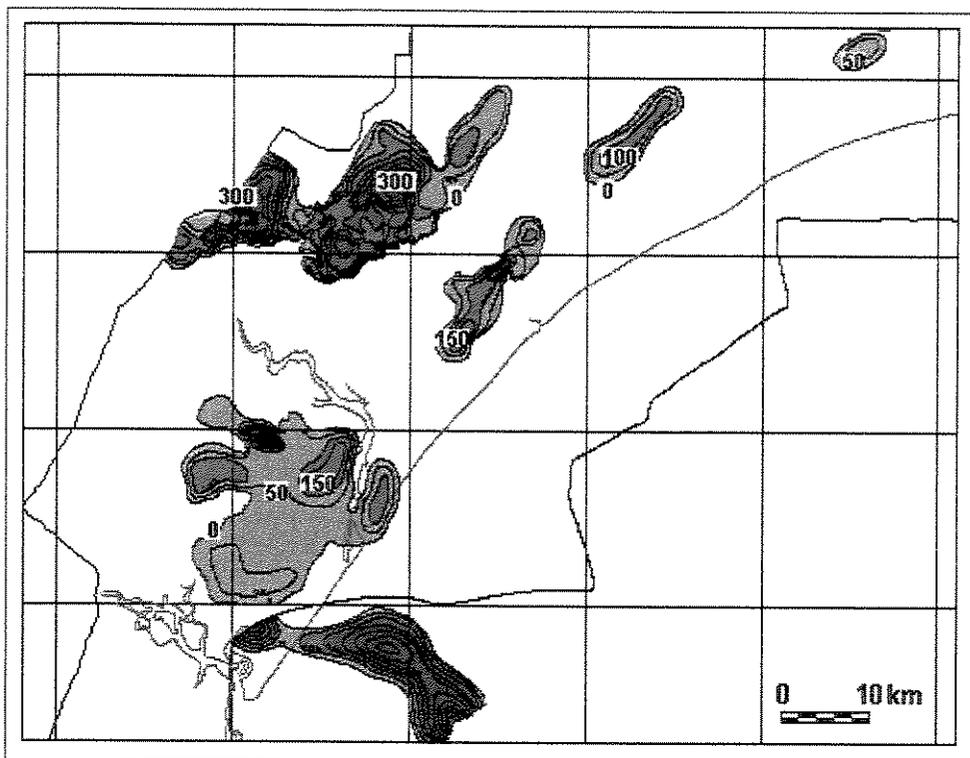


Figura 3.5: Mapa de isólicas de sais solúveis do Membro Ibura (Intervalo de contorno = 50 m).

3.2 – Mapeamento de Salinidade

3.2.1 – Seleção de dados

Os dados utilizados para elaboração do mapa de isossalinidade da água do Membro Carmópolis são provenientes de 264 análises de amostras de água recuperadas, predominantemente, em testes de formação a poço aberto. Eventualmente, também foram utilizadas amostras de água produzida com óleo e amostras de testes a poço revestido.

No processo de seleção de dados, basicamente foram descartados os resultados que apresentaram indicações de contaminação pelo fluido de perfuração. Em relação às amostras provenientes dos campos de petróleo, com programas de injeção de água implantado, tomou-se o cuidado de utilizar apenas os dados anteriores ao início desta atividade, eliminando-se a possibilidade de trabalhar-se com amostras diluídas no reservatório. Com estes cuidados, espera-

se que o mapa elaborado represente a salinidade da água de formação imediatamente anterior ao início da atividade exploratória.

3.2.2 – Mapa de isossalinidade

O mapa de isossalinidade do Membro Carmópolis evidencia um complexo e evoluído padrão de salinização da água de formação. De uma forma geral, verifica-se uma tendência de aumento da salinidade da borda da bacia, onde ocorrem concentrações inferiores a 20 g/L de NaCl equivalente, em direção à plataforma continental, onde a salinidade atinge concentrações superiores a 150 g/L. No meio desta tendência, são observados alguns núcleos onde a salinidade atinge valores bastante elevados, superiores a 200 g/L, perturbando este padrão de variação. Estas anomalias ficam ainda mais evidentes em áreas como a do Campo C, tendo em vista a proximidade de águas de baixas concentrações com águas muito salinizadas, embora estas anomalias também ocorram em outras partes da unidade (Figura 3.6).

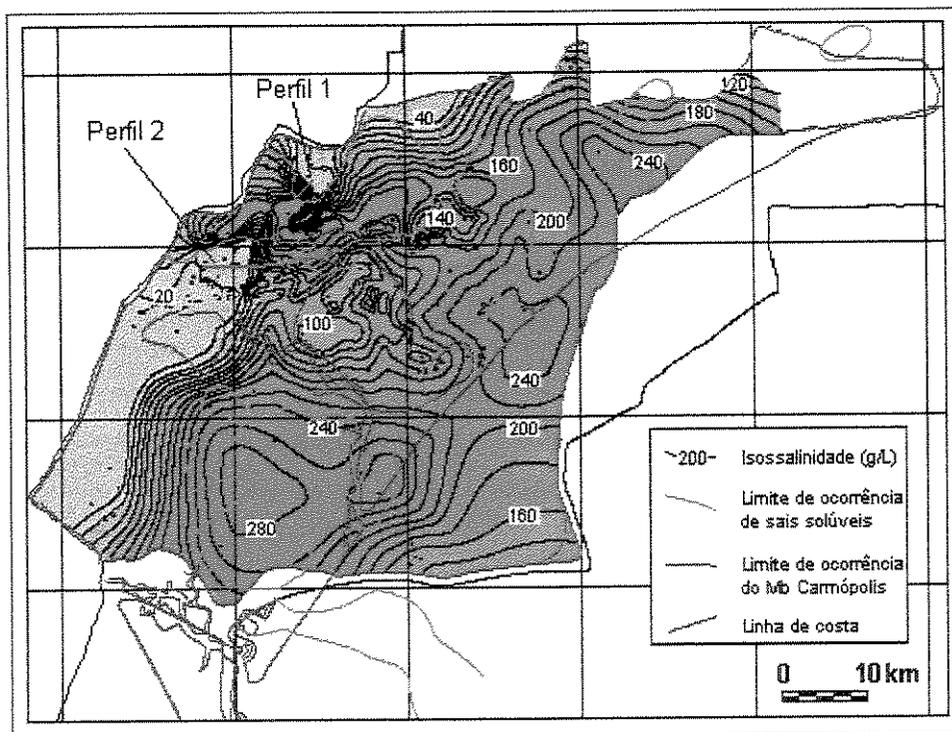


Figura 3.6: Mapa de isossalinidade da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis e limite de ocorrência dos sais solúveis do Membro Ibura (Intervalo de contorno = 20 g/L).

Em relação à construção do mapa, é interessante ressaltar que nos locais de altos internos do embasamento, onde o Membro Carmópolis não ocorre, foram utilizados os dados de salinidade das amostras recuperadas no embasamento fraturado para dar continuidade ao traçado das curvas de isossalinidade. Salienta-se que o Membro Carmópolis adjacente a estas áreas constitui um sistema de pressão comunicado com o embasamento fraturado.

3.2.3 – Considerações preliminares

A observação detalhada do mapa de isossalinidade, onde também está desenhado o limite de ocorrência dos sais solúveis do Membro Ibura (Figura 3.6), permite verificar que existe uma notável correspondência entre as áreas com águas mais salinizadas do Membro Carmópolis e as áreas com ocorrência de sais solúveis, indicando que o processo de salinização da água é controlado pelos sais solúveis. Este comportamento é ainda mais perceptível quando observado em seção geológica, onde é possível visualizar a relação espacial do sal solúvel com a salinidade da água (Figuras 3.7 e 3.8).

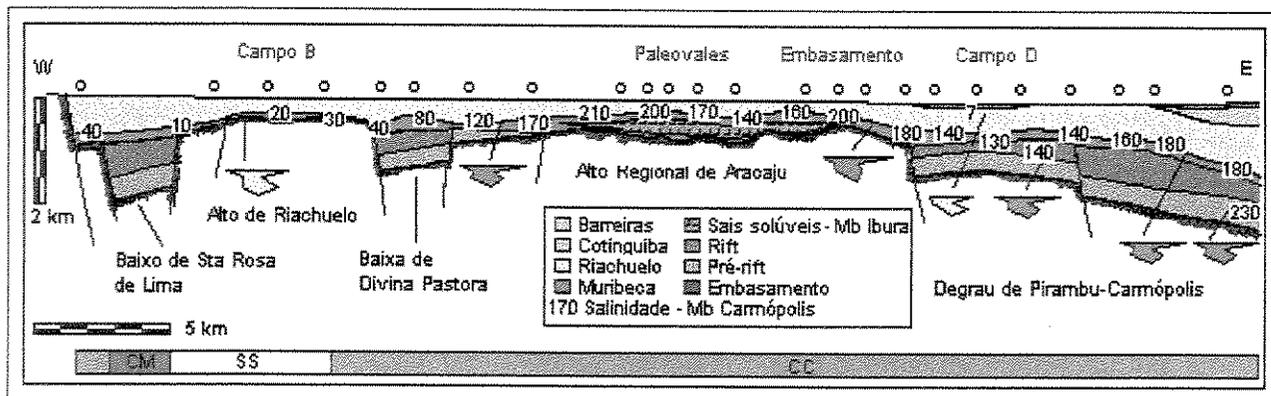


Figura 3.7: Seção Geológica 1 evidenciando a relação espacial entre os sais solúveis do Membro Ibura e a salinidade da água do Membro Carmópolis. Também estão representados os Diagramas de Stiff característicos da água das diferentes unidades estratigráficas e, na barra de cores inferior, os tipos genéticos de água do Membro Carmópolis de acordo com a Classificação de Sulin (CM- cloreto-magnésiana, SS- sulfato-sódica e CC- cloreto-cálcica).

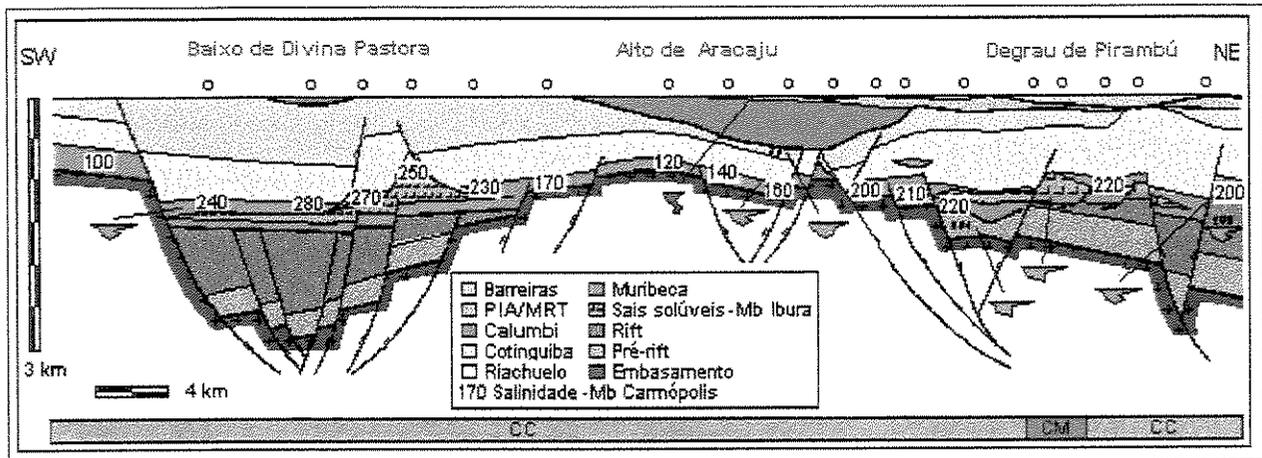


Figura 3.8: Seção Geológica 2 evidenciando a relação espacial entre os sais solúveis do Membro Ibura e a salinidade da água do Membro Carmópolis. Também estão representados os Diagramas de Stiff característicos da água das diferentes unidades estratigráficas e, na barra de cores inferior, os tipos genéticos de água do Membro Carmópolis de acordo com a Classificação de Sulin (CC- cloreto-cálcica e CM- cloreto-magnésiana).

Os dados apresentados evidenciam que está em curso um processo de dissolução de sais, e que, desta forma, a salinidade da água do Membro Carmópolis vem sendo modelada ao longo do tempo geológico por um processo de difusão iônica. Na Figura 3.9 são plotados valores de salinidade da água de formação extraídos de uma área central do mapa de isossalinidade, em função da distância horizontal a partir de uma determinada almofada de sal presente no Membro Ibura. O perfil de salinidade resultante sugere um estado dinâmico, variante no tempo, dado o comportamento não linear da salinidade com a distância, correspondendo a um típico perfil de difusão iônica transiente. O ponto em vermelho foi acrescentado separadamente e corresponde a concentração de equilíbrio termodinâmico da halita na água.

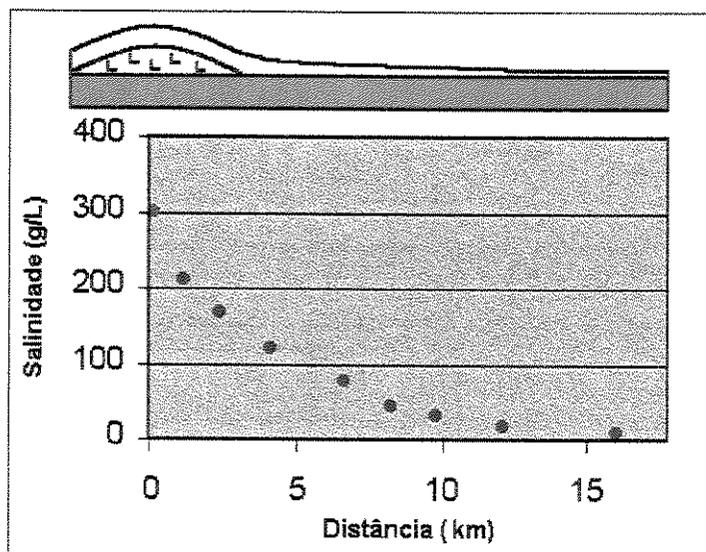


Figura 3.9: Gráfico de salinidade *versus* distância a partir de um corpo de sal, característico da porção central do Membro Carmópolis.

3.3 – Caracterização Hidrogeoquímica

A água de formação é uma solução química muito ativa, apresentando grande facilidade de dissolver e reagir com outras substâncias. Esta característica faz com que as águas subterrâneas apresentem uma grande quantidade de espécies dissolvidas, uma vez que estão em contato direto com os mais diversos tipos de rochas. Normalmente, a maior parte das substâncias dissolvidas encontra-se na forma iônica. Entre os íons, são mais comuns os ânions e cátions simples, como o cloreto (Cl^-), bicarbonato (HCO_3^-), sulfato (SO_4^{2-}), sódio (Na^+), cálcio (Ca^{++}), e magnésio (Mg^{++}).

Com base nos constituintes iônicos dissolvidos, existem várias formas de caracterizar e classificar as águas de formação. A seguir é apresentada a caracterização hidrogeoquímica da água do Membro Carmópolis de acordo com a Classificação de Sulín, Diagramas de Stiff e algumas correlações entre íons. Esta caracterização é fundamental para elaboração do modelo geológico de salinização da água de formação.

3.3.1 – Classificação de Sulin

Considerando diversas combinações e razões entre os principais íons dissolvidos nas águas de formação, Sulin (1946), *apud* Dickey (1966), propôs um sistema de classificações de águas que possibilita a caracterização de diferentes ambientes de distribuição das águas subterrâneas. Sua classificação tem grande importância na hidrogeoquímica, uma vez que permite distinguir quatro tipos genéticos de água que podem ser associados com a ocorrência de hidrocarbonetos. Para aplicar esta classificação é necessário calcular as razões entre íons especificadas na Tabela 3.1, em miliequivalentes por litro (meq/L).

Tabela 3.1: Tipos genéticos e respectivos limites de razões de teores de íons segundo a Classificação de Sulin.

Tipo Genético	Na^+/Cl^-	$(\text{Na}^+ - \text{Cl}^-)/\text{SO}_4^{2-}$	$(\text{Cl}^- - \text{Na}^+)/\text{Mg}^{++}$
Bicarbonato-sódico	>1	>1	<0
Sulfato-sódico	>1	<1	<0
Cloreto-magnésiano	<1	<0	<1
Cloreto-cálcico	<1	<0	>1

Os dois primeiros tipos genéticos definidos por Sulin, bicarbonato-sódico e sulfato-sódico, são característicos de águas continentais, meteóricas e/ou artesianas; o terceiro tipo, cloreto-magnésiano, de ambientes marinhos ou associado com seqüências evaporíticas; e o quarto tipo, cloreto-cálcico, refere-se a ambientes fechados, caracterizando condições estagnantes ou hidrostáticas.

Bojarski (1970), *apud* Collins (1975), verificou a seguinte relação com a preservação de hidrocarbonetos: águas do tipo bicarbonato-sódicas ocorrem na zona superior de sedimentação de uma bacia, com intensa troca de água, caracterizando uma situação hidrodinâmica ativa, que proporciona uma condição desfavorável para preservação de hidrocarbonetos, enquanto as águas cloreto-cálcicas ocorrem em zonas mais profundas, isoladas da infiltração de água meteórica, caracterizando ambientes hidrostáticos, adequados à preservação das acumulações de petróleo.

A água do Membro Carmópolis foi classificada de acordo com a Classificação de Sulin. Conforme pode-se perceber no mapa de caracterização da água (Figura 3.10) e nas seções geológicas 1 e 2 (Figuras 3.7 e 3.8), os quatro tipos genéticos estão representados. De uma forma geral, verifica-se uma grande predominância de águas cloreto-cálcicas, indicando um caráter predominantemente estagnante desta unidade. Águas cloreto-magnesianas ocorrem em porções isoladas, próximas as ocorrências de sais solúveis, corroborando o modelo de dissolução de sal, e águas bicarbonato-sódicas e sulfato-sódicas ocorrem em regiões restritas, junto à borda da bacia, indicando a influência de um regime meteórico.

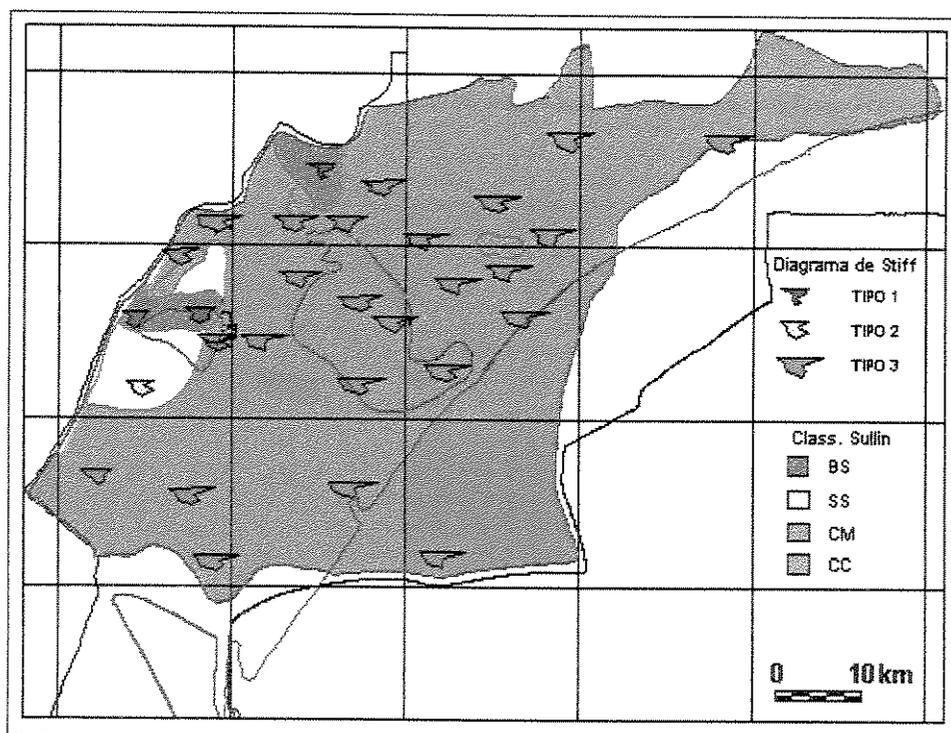


Figura 3.10: Mapa de caracterização hidrogeoquímica do Membro Carmópolis mostrando os Diagramas de Stiff característicos desta unidade e os tipos genéticos de água de acordo com a Classificação de Sulin (BS – bicarbonato-sódica, SS- sulfato-sódica, CM- cloreto-magnesianas, e CC- cloreto-cálcica).

3.3.2 – Diagramas de Stiff

Stiff (1951) propôs uma forma gráfica para representar os íons dissolvidos na água que é amplamente utilizada na indústria do petróleo e conhecida como Diagrama de Stiff. Este

diagrama consiste de quatro eixos horizontais, cortados por um vertical central, que corresponde aos teores zero. No lado direito do diagrama são plotados os teores dos ânions (cloreto, bicarbonato, sulfato e carbonato) e do lado esquerdo os teores dos cátions (sódio, cálcio, magnésio e ferro), em miliequivalentes por litro (meq/L). Unindo-se os pontos plotados em cada eixo obtém-se uma figura geométrica que varia de acordo com a proporção dos teores de cada íon (Figura 3.11).

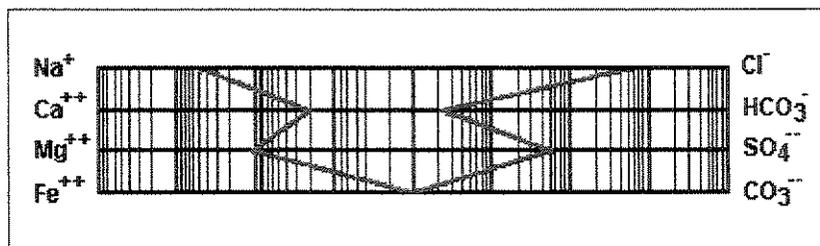


Figura 3.11: Exemplo de Diagrama de Stiff, em escala logarítmica, característico da água do mar.

A principal utilização do Diagrama de Stiff é facilitar a correlação de águas através da comparação visual das formas geométricas. Objetivando caracterizar as figuras mais representativas do Membro Carmópolis, foram selecionados três diagramas-tipo, mais suas variantes, a partir de 70 análises de água disponíveis para esta unidade, conforme ilustrado na Figura 3.12.

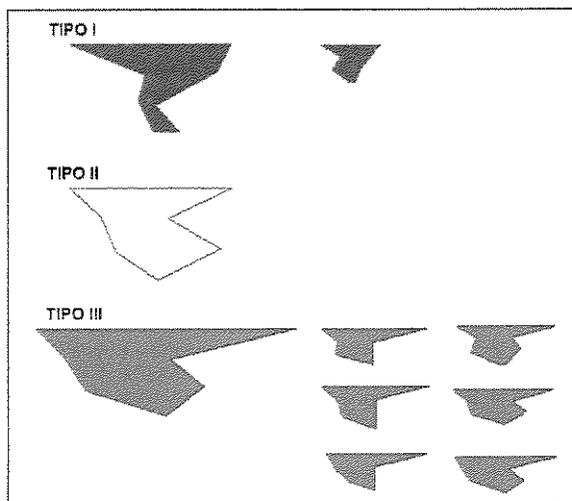


Figura 3.12: Diagramas de Stiff característicos da água do Membro Carmópolis.

O primeiro tipo é caracterizado pela marcante presença de bicarbonato no lado dos ânions, suplantando o sulfato, e um pico de cloreto relativamente pouco desenvolvido. No lado dos cátions, observa-se uma deflexão para dentro do diagrama tendo em vista os baixos teores de cálcio em relação ao sódio e magnésio. O segundo tipo caracteriza-se pela existência de dois picos de tamanhos semelhantes do lado dos ânions, o que deve-se ao baixo teor de bicarbonato em relação ao cloreto e sulfato. No lado esquerdo do diagrama também ocorre uma deflexão para dentro da figura, contudo neste caso os teores de cálcio são maiores que os de magnésio. O terceiro tipo é caracterizado por um pico muito desenvolvido de cloreto, o que deve-se ao alto teor deste ânion, associado a um baixo teor de bicarbonato. Como variações deste diagrama, pode ocorrer um segundo pico do lado dos ânions, bem menos desenvolvido que o de cloreto, em função da presença ou não do íon sulfato na água. Do lado dos cátions, ocorre uma inversão completa nos teores de cálcio e magnésio, ora com uma deflexão para dentro da figura, ora para fora.

A distribuição em planta dos diagramas pode ser observada no mapa de caracterização hidrogeoquímica do Membro Carmópolis (Figura 3.10) e também nas seções geológicas 1 e 2 (Figuras 3.7 e 3.8). Conforme pode-se observar, os tipos I e II estão restritos a porções isoladas na borda da bacia e encontram-se associados a águas bicarbonato-sódicas e sulfato-sódicas. No geral, observa-se uma grande predominância do diagrama do tipo III, ocorrendo este normalmente associado a águas cloreto-cálcicas e eventualmente a águas cloreto-magnesianas.

Ainda em relação ao tipo III, podemos perceber que via de regra o pico de sulfato está presente no diagrama, estando ausente apenas em áreas restritas, como na porção sudeste do Membro Carmópolis (Campo A). Este fato pode estar relacionado com a presença do íon bário na água de formação nestas áreas. O bário e sulfato formam um composto de baixíssima solubilidade (barita), sendo praticamente incompatível a coexistência destas espécies dissolvidas na água. Outra observação que pode ser feita, é a tendência de inversão da deflexão sódio-cálcio-magnésio, de dentro para fora da figura-tipo, da borda da bacia em direção ao mar. Na realidade, isto representa um aumento da razão Ca/Mg com a profundidade, refletindo uma possível incorporação de magnésio pelos argilo-minerais da formação (transformação de caulinita em clorita) e liberação de cálcio (transformação de esmectita em ilita).

3.3.3 – Correlações entre íons

Segundo Dickey (*op. cit.*), as águas de formação apresentam uma composição iônica bastante modificada em relação a da água do mar. Nas águas de formação mais evoluídas, os teores de sulfatos e bicarbonatos são muito baixos, sendo os cloretos os ânions predominantes. Entre os cátions, as maiores partes são constituídas de sódio, cálcio e magnésio, com predomínio do primeiro. A razão Ca/Mg tende a ser maior que 3:1, enquanto na água do mar é 1:5. Já nas águas artesianas, ao invés dos cátions, as principais variações ocorrem nos ânions, que possuem quantidades significativas de bicarbonatos e sulfatos. Entre os cátions predomina o sódio, com cálcio e magnésio muitas vezes ausentes.

Com a finalidade de observar o comportamento dos principais íons presentes nas águas do Membro Carmópolis, foram construídos alguns gráficos correlacionando profundidade, razões entre íons e os íons mais abundantes nas águas de formação (Figuras 3.13 a 3.18). Em todos os gráficos estão plotados os pontos/linhas referentes aos teores presentes na água do mar como parâmetro de referência. Os teores utilizados estão expressos em miliequivalentes por litro (meq/L).

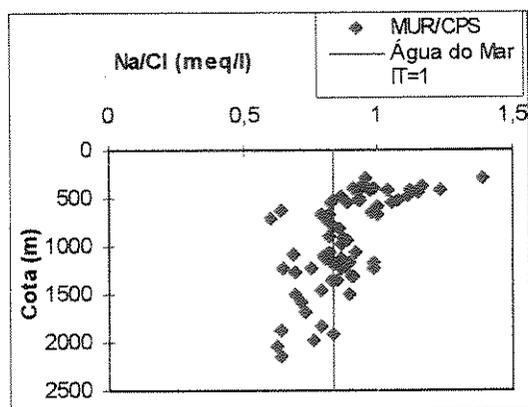


Figura 3.13: Gráfico da razão Na/Cl *versus* cota, sugerindo a influência de água meteórica nas porções mais rasas, onde IT (índice de transformação) é maior que 1.

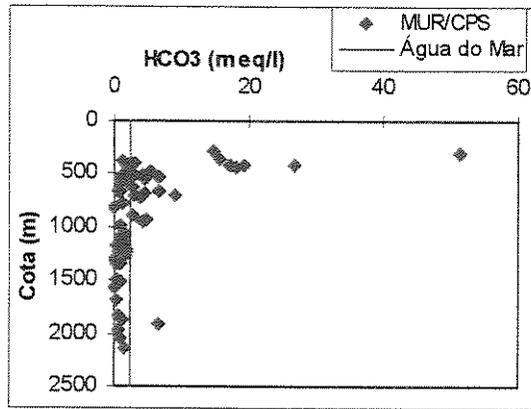


Figura 3.14: Gráfico de bicarbonato *versus* cota. O alto teor de bicarbonato nas porções mais rasas evidencia a influência de água meteórica.

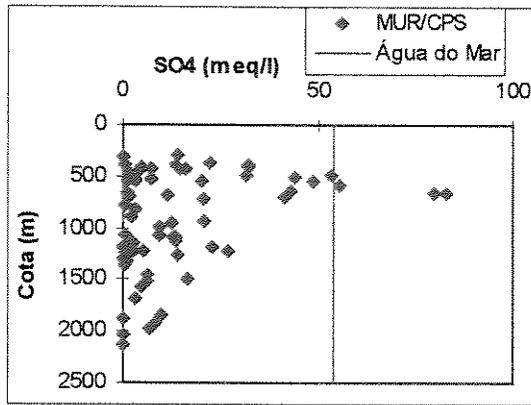


Figura 3.15: Gráfico de sulfato *versus* cota. O sulfato mais abundante nas porções mais rasas também sugere a influência de água meteórica.

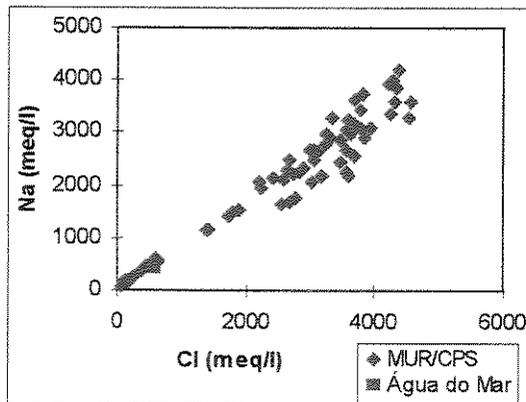


Figura 3.16: Gráfico sódio *versus* cloro. A boa correlação indica a tendência destes íons se neutralizarem na água de formação.

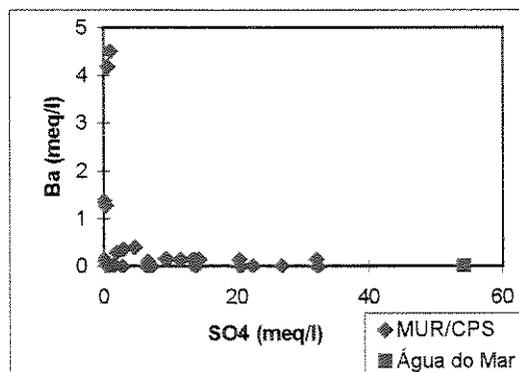


Figura 3.17: Gráfico de sulfato *versus* bário evidenciando a incompatibilidade de coexistência destes íons dissolvidos na água de formação.

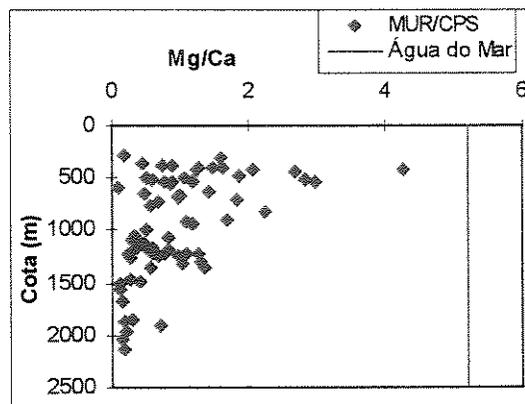


Figura 3.18: Gráfico da razão Mg/Ca *versus* cota. A diminuição da razão Mg/Ca com a profundidade sugere a incorporação de magnésio e liberação de cálcio pela formação. A existência de razões significativamente menores que a da água do mar pode estar relacionada a cristalização de grandes quantidades de dolomita.

O gráfico da razão Na/Cl *versus* a cota do topo do intervalo amostrado (Figura 3.13) fornece uma idéia da profundidade limite entre ambientes abertos e estagnantes. A razão Na/Cl, definida como índice ou coeficiente de transformação (Novosiletskiy *et al*, 1977, *apud* Araujo, 1993) igual a um marca o limite entre estes ambientes. Neste caso, pode-se observar que existe influência de água meteórica até aproximadamente 500 metros. Este comportamento reflete-se nos gráficos de bicarbonato e sulfato *versus* a cota (Figuras 3.14 e 3.15) que, no caso, apresentam teores mais altos nas porções mais rasas, suplementando o déficit do íon cloro em relação ao

sódio. No gráfico de sódio *versus* cloro (Figura 3.16) observa-se uma relação linear direta, indicando que normalmente estes íons tendem a se neutralizarem. O bário e o sulfato formam sais de baixíssima solubilidade (barita), sendo, conforme já comentado, íons praticamente incompatíveis de coexistência nas águas de formação. Este comportamento pode ser observado na água do Membro Carmópolis (Figura 3.17). No gráfico de razão de Mg/Ca *versus* cota (Figura 3.18), observa-se que todas as amostras apresentam razões menores que a da água do mar, havendo uma tendência de diminuir ainda mais com a profundidade. Folk e Land (1975) afirmam que uma diminuição desta razão para valores na ordem de 1:2 ou 1:4, típicos de águas subterrâneas, deve-se a cristalização de grandes quantidades de dolomita e argilas magnesianas. Segundo estes autores, para cristalizar dolomita é necessário uma razão de 5-10:1, em ambientes hipersalinos, podendo, com diluição progressiva da salinidade (como influência de águas meteóricas), formar-se com razões de até 1:1.

3.4 – Modelo de Salinização

Com base no modelo deposicional do Membro Carmópolis apresentado no início deste capítulo, onde foi comentado que esta unidade é característica de um ambiente que alternava-se entre continental e marinho, pode-se concluir que a água singenética, ou água original do ambiente sedimentar, deveria apresentar uma salinidade inicial próxima a da água doce ou, no máximo, equivalente a salinidade da água do mar (~35 g/L). O complexo padrão de salinidade verificado no presente foi atribuído a presença dos sais solúveis na unidade imediatamente acima, tendo em vista a notável correlação observada entre as áreas com águas mais salinizadas do Carmópolis e as áreas com ocorrência de sais solúveis do Membro Ibura.

Uma vez verificado que água do Membro Carmópolis está sendo salinizada no presente, por dissolução de sal do Membro Ibura e difusão iônica, uma questão importante é saber a quanto tempo este processo vem ocorrendo.

3.4.1 – Relação temporal

A seção geológica da Figura 3.19, confeccionada a partir de dados de poços e sísmica 3D de um campo de petróleo da área, é particularmente importante, porque além de permitir visualizar com mais precisão a relação espacial do sal com o aquífero, permite inferir a respeito do início do processo de dissolução de sal.

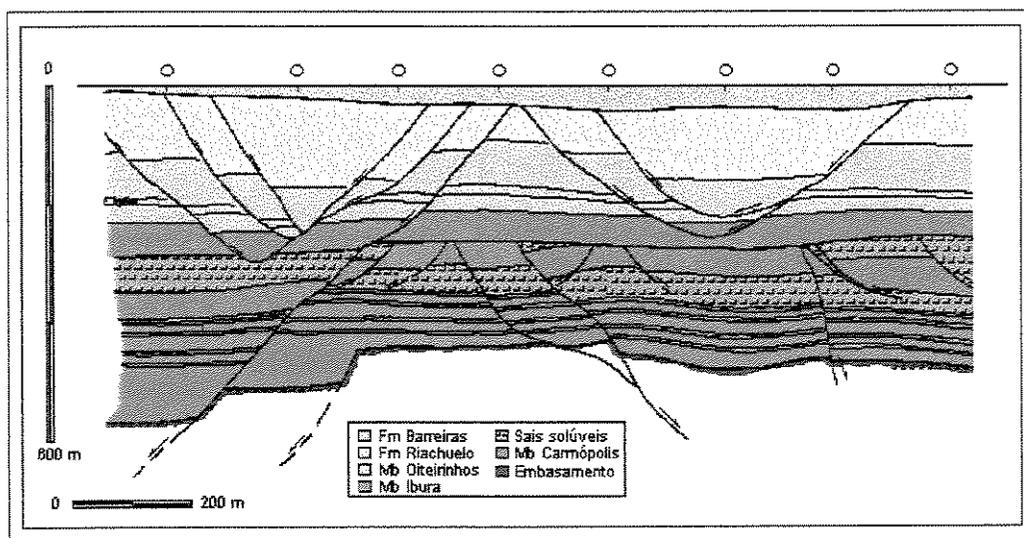


Figura 3.19: Seção geológica baseada em dados sísmicos e de subsuperfície evidenciando a relação espacial e temporal dos sais solúveis do Membro Ibura com o Membro Carmópolis.

Conforme pode-se visualizar na seção geológica, são verificados dois tipos distintos de falhas: um sistema mais recente (Albiano), possivelmente causado pela movimentação e dissolução do sal, provocando a ruptura e desmoronamento das unidades superiores e, outro mais antigo (Neo-aptiano), caracterizado por falhas que tem raiz no embasamento, cortam o Membro Carmópolis, com frequência justapondo os reservatórios do topo desta unidade com os sais solúveis, e terminam no topo do sal.

Tendo em vista que o sistema mais antigo é contemporâneo ao sal, é possível concluir que os processos de dissolução no Membro Ibura e salinização da água do Carmópolis por difusão iônica vêm ocorrendo desde a época em que se formaram os depósitos salíferos, no Neo-aptiano, a 114 Ma.

3.4.2 – Modelo de pré-salinização

Embora tenha sido comentado no início desta seção a respeito das condições iniciais de salinidade da água do Membro Carmópolis, existem fortes evidências da ocorrência de um processo de pré-salinização, anterior ao início da dissolução de sais e difusão iônica, causado pela infiltração da salmoura do ambiente evaporítico do Ibura que estava implantando-se. Estas evidências estão embasadas nos processos diagenéticos que a unidade foi submetida e também na relação entre o teor de brometo e sólidos totais dissolvidos verificado na água de formação. A pequena espessura dos folhelhos capeadores do Carmópolis (pouco maior que 10 m), aliada aos falhamentos ativos na época, que propiciavam o desenvolvimento da própria bacia evaporítica, favoreceram a atuação deste mecanismo.

O reconhecimento deste processo é de fundamental importância para modelagem numérica da salinização, uma vez que implica em concentrações iniciais muito mais elevadas que aquelas previstas com base exclusivamente na salinidade da água singenética.

Rittenhouse (1967) sugeriu que a variação dos teores de brometos e cloretos dissolvidos na água pode ser utilizada para distinção entre águas de formação originadas a partir da dissolução subsuperficial de halita e águas originadas pela evaporação subaérea de água do mar. Com base no gráfico de teor de brometos *versus* teor de sólidos dissolvidos (TSD) (Figura 3.20), Rittenhouse subdividiu a água em cinco grupos distintos:

- Grupo I - Águas cujo teor de brometos e TSD se aproximam daquele esperado pela simples concentração de água do mar ou sua diluição com água doce.
- Grupo II - Águas semelhantes ao grupo I, porém com o dobro do conteúdo de brometo para uma dada concentração de TSD. O brometo adicional poderia ser acrescido durante o início da diagênese, devido a menor eficiência da membrana argilosa em reter ânions de cloro.

- Grupo III - Águas cujo TSD é maior que o da água do mar, mas o conteúdo de brometo é menor que o esperado pelo processo de evaporação desta. Estas águas seriam formadas pela dissolução de halita, onde a razão Br/Cl é muito menor que na água do mar.
- Grupo IV - Águas cujo TSD é menor que o da água do mar e o conteúdo de brometo é menor que o esperado pela simples diluição desta. Podem ser originadas pela diluição com águas contendo apreciável teor de sólidos dissolvidos e baixo brometo, ou diluição de águas do grupo III.
- Grupo V - Águas de alta salinidade e com teor de brometo maior que o do grupo II. Estas águas estão associadas com espessos pacotes de sal e parecem estar relacionadas com soluções residuais após a deposição do sais. A origem destas águas não é bem conhecida.

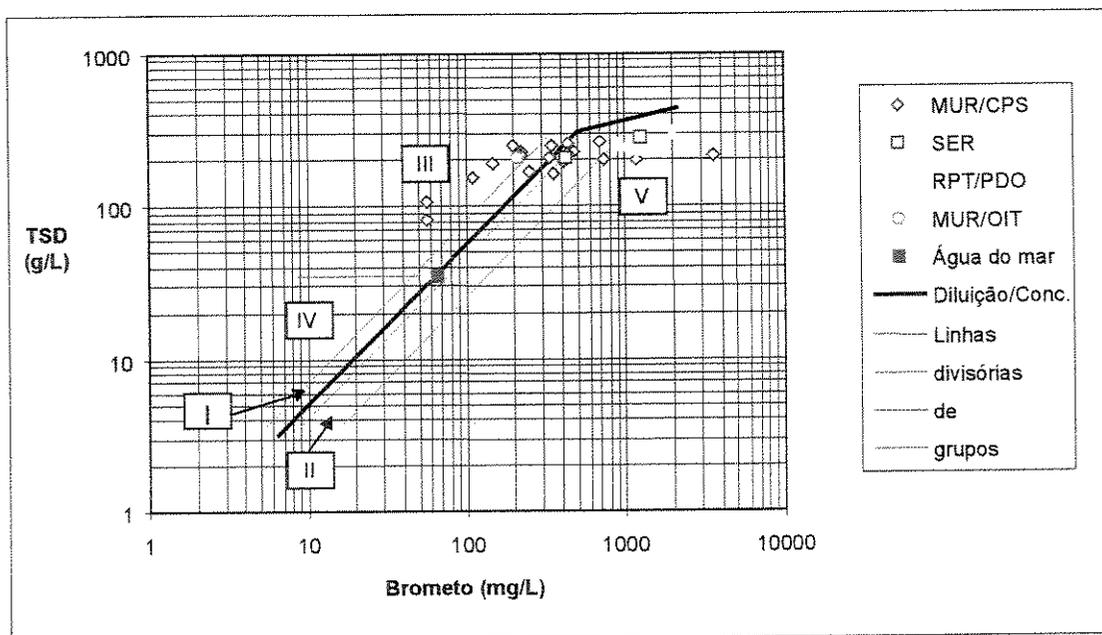


Figura 3.20: Gráfico de Rittenhouse com os dados de TSD *versus* brometo das águas do Membro Carmópolis e unidades adjacentes.

A água do mar apresenta um teor de brometo de aproximadamente 65 mg/L e um TSD de 35 g/L, conforme representado no gráfico de Rittenhouse. Com a remoção de água por evaporação, ocorre um aumento na concentração de brometos e no TSD, conforme a linha mais espessa do gráfico. Continuando o processo de evaporação, primeiramente são precipitados os carbonatos e sulfatos, permanecendo os brometos em solução e havendo pouca diminuição do TSD. Quando o volume total for reduzido para aproximadamente 10% do inicial (concentração de aproximadamente 350 g/L) começa a precipitação dos cloretos (halita com brometo entre 40 e 70 mg/L) e o teor de brometo da solução pode chegar até aproximadamente 500 mg/L.

No caso da água do Membro Carmópolis, é observada uma tendência de aumento do teor de brometo em função da concentração total, com águas apresentando deficiência em brometo com relação à linha de evaporação da água do mar (Grupo III), e águas ajustadas com esta linha (Grupo I) ou até enriquecidas em brometo (Grupos II e V). Estes dados corroboram o modelo de salinização por dissolução de sal e fortalecem a hipótese da ocorrência de um processo de pré-salinização, provavelmente causado pela infiltração de salmoura do ambiente evaporítico para a seqüência sedimentar sotoposta.

Outra evidência que corrobora o modelo de pré-salinização está relacionada com a própria história diagenética do Carmópolis. Segundo Souza (*op. cit.*), um dos principais processos diagenéticos que ocorreu nesta unidade foi uma cimentação precoce por dolomita, de forma extensiva ao longo de toda unidade, sob a influência de soluções hipersalinas ricas em magnésio. Esta dolomita é característica do estágio eodiagenético (estágio com influência de processos superficiais) e atuou posteriormente no sentido de sustentar o arcabouço da rocha, inibindo a compactação. Um dos processos utilizados para explicar a dolomitização é justamente a infiltração de soluções evaporíticas, com alta razão Mg/Ca, para os sedimentos sotopostos (Davies, 1979). Estas soluções normalmente encontram-se bastante depletadas no íon cálcio, uma vez que são posteriores ao ponto de precipitação da gipsita, e bastante salinizadas (aproximadamente 124 g/L).

Especialmente, é provável que o processo de pré-salinização tenha ocorrido de forma simultânea em vários pontos do Carmópolis. Existem fortes evidências que a extensão da bacia evaporítica era bem mais ampla que a área representada por sais solúveis no presente. Além da área de ocorrência de anidrita, já comentada, são comuns brechas de colapso das unidades sobrepostas ao Ibura, evidenciando que uma parte dos sais já foram dissolvidos e incorporados às águas subterrâneas.

Assim, conclui-se que, quando os processos de dissolução e difusão começaram a ocorrer a 114 Ma, a salinidade inicial da água do Membro Carmópolis era significativamente superior a da água doce ou a da água do mar, característicos do ambiente ao qual foi depositado.

3.5 – Interpretação Hidrogeológica

A grande predominância de águas classificadas como cloreto-cálcicas indica um caráter preferencialmente hidrostático para o Membro Carmópolis. A presença de águas bicarbonato-sódicas e sulfato-sódicas de baixa salinidade em áreas localizadas junto à borda da bacia, indica a existência de um ambiente aberto (através dos conglomerados da Formação Riachuelo / Membro Angico), com influência de água meteórica. Caso contrário, seria de se esperar que o processo de salinização estivesse mais avançado nestas áreas. Contudo, isto não implica necessariamente que a água doce percole para o interior da bacia como num ambiente hidrodinâmico clássico. A existência de águas muito salinizadas (pesadas) adjacentes a estas áreas, aliado a inexistência de uma zona de recarga elevada, dificultam a penetração da água superficial.

Com base no modelo de salinização apresentado e na sua própria história diagenética, imagina-se que o Membro Carmópolis tenha tornado-se predominantemente estagnante de forma precoce, sendo pouco provável a existência de um regime meteórico extensivo, mesmo no passado.

Capítulo 4

Simulador de Difusão Iônica

O simulador de difusão iônica consiste basicamente em um programa de computador que permite a resolução numérica da equação diferencial que descreve a difusão molecular no meio poroso. Nesta equação, a incógnita que deseja-se determinar, no tempo e no espaço, é a função concentração. A diferença básica entre o simulador e um programa comum é que o primeiro possibilita uma grande flexibilidade em relação às condições iniciais e de contorno, bem como atribuir células nulas no interior do sistema.

Para a elaboração do simulador foi resolvida a equação da difusão utilizando a técnica numérica de diferenças finitas, sendo as rotinas de cálculo programadas através do aplicativo *Fortran PowerStation™* da *Microsoft*.

4.1 – Resolução Numérica da Equação da Difusão

A essência dos métodos numéricos está na discretização do contínuo, o que torna o problema finito e viabiliza sua solução através de computadores (Cunha, 1993). A idéia geral do método das diferenças finitas é a discretização das derivadas de $y(x)$ que aparecem na equação diferencial. A ferramenta básica na definição das aproximações para as derivadas é a série de Taylor. A série de Taylor nos diz como a informação de uma função no ponto x pode ser usada na avaliação desta função na vizinhança de x , ou seja, $x+h$. Se uma função tem derivadas em x até a ordem $n+1$, esta função pode ser expandida na série :

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}y^n(x) + erro \quad (4.1)$$

O último termo da expressão representa o erro de aproximação de $y(x+h)$ pelo polinômio de grau n .

No nosso caso, a série de Taylor será utilizada na discretização de derivadas de 1ª e 2ª ordem, cujas fórmulas são:

- Derivada de 1ª ordem, fórmula avançada:

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - erro \quad (4.2)$$

- Derivada de 1ª ordem, fórmula centrada:

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} - erro \quad (4.3)$$

- Derivada de 2ª ordem:

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - erro \quad (4.4)$$

A seguir é mostrada a discretização das derivadas da equação da difusão na sua forma unidimensional, com coeficiente de difusão constante, e também da equação em três dimensões, para meios heterogêneos e anisotrópicos na direção z , conforme utilizado no simulador de difusão desenvolvido.

4.1.1 – Discretização da equação unidimensional

A equação da difusão na sua forma unidimensional para meios homogêneos é dada pela expressão

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

Para a discretização da derivada da concentração no tempo é utilizada a fórmula avançada, enquanto que para a discretização da derivada segunda no espaço, a fórmula da derivada de 2ª ordem. Procedendo-se desta forma, obtém-se as seguintes expressões:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} \quad (4.6)$$

Onde:

C_i^{k+1} - concentração no espaço i , no tempo $k+1$

C_i^k - concentração no espaço i , no tempo k

$$\frac{d^2 C}{dx^2} = \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{(\Delta x)^2} \quad (4.7)$$

Substituindo os termos discretizados e isolando a concentração no tempo avançado, chega-se a equação discretizada:

$$C_i^{k+1} = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) + C_i^k \quad (4.8)$$

4.1.2 – Discretização da equação tridimensional

A equação da difusão iônica em três dimensões, para meios heterogêneos e anisotrópicos na direção z , conforme utilizado no simulador de difusão desenvolvido é dada pela expressão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}{\partial z} \quad (4.9)$$

Inicialmente é importante considerar que, na programação do simulador, os coeficientes de difusão nas direções x e y , assim como o espaçamento nestas direções, foram considerados iguais. Assim, as variáveis envolvidas são:

C – concentração

$D_x = D_y = D$ – coeficientes de difusão nas direções x e y

D_z – coeficiente de difusão na direção z

$\Delta x = \Delta y = h$ – passo no espaço nas direções x e y

$\Delta z = h_z$ – passo no espaço na direção z

Δt – passo no tempo (*time step*)

A convenção adotada para os índices utilizados na discretização das derivadas foi:

k – tempo

i – espaço na direção x

j – espaço na direção y

m – espaço na direção z

Na discretização da derivada da concentração no tempo foi utilizada a fórmula avançada, resultando na seguinte expressão:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_{i,j,m}^{k+1} - C_{i,j,m}^k}{\Delta t} \quad (4.10)$$

Onde:

$C_{i,j,m}^{k+1}$ - concentração no espaço i,j,m , no tempo $k+1$

$C_{i,j,m}^k$ - concentração no espaço i,j,m , no tempo k

Para discretizar as derivadas no espaço, inicialmente é necessário resolver o produto de derivadas representado entre parêntesis na equação 4.9. Para o caso da derivada em x tem-se:

$$\partial \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = D \frac{d^2 C}{dx^2} + \frac{dC}{dx} + \frac{dD}{dx} \quad (4.11)$$

A discretização do termo com derivada segunda resulta na seguinte expressão:

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} = D \frac{C_{i+1,j,m}^k - 2C_{i,j,m}^k + C_{i-1,j,m}^k}{(\Delta x)^2} \quad (4.12)$$

Nos termos com derivada primeira foi utilizada a discretização centrada, obtendo-se:

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C_{i+1,j,m}^k - C_{i-1,j,m}^k}{2\Delta x} \quad (4.13)$$

$$\frac{dD}{dx} = \frac{D_{i+1,j,m} - D_{i-1,j,m}}{2\Delta x} \quad (4.14)$$

Somando os termos discretizados em 4.12, 4.13 e 4.14 obtém-se:

$$\frac{\partial \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{\partial x} = D \frac{C_{i+1,j,m}^k - 2C_{i,j,m}^k + C_{i-1,j,m}^k}{h^2} + \frac{C_{i+1,j,m}^k - C_{i-1,j,m}^k}{2h} + \frac{D_{i+1,j,m} - D_{i-1,j,m}}{2h} \quad (4.15)$$

Repetindo o procedimento de 4.11 a 4.15 para as derivadas em y e z , obtém-se:

$$\frac{\partial \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right)}{\partial y} = D \frac{C_{i,j+1,m}^k - 2C_{i,j,m}^k + C_{i,j-1,m}^k}{h^2} + \frac{C_{i,j+1,m}^k - C_{i,j-1,m}^k}{2h} + \frac{D_{i,j+1,m} - D_{i,j-1,m}}{2h} \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \left(Dz \frac{\partial C}{\partial z} \right)}{\partial z} = Dz \frac{C_{i,j,m+1}^k - 2C_{i,j,m}^k + C_{i,j,m-1}^k}{hz^2} + \frac{C_{i,j,m+1}^k - C_{i,j,m-1}^k}{2hz} + \frac{Dz_{i,j,m+1} - Dz_{i,j,m-1}}{2hz} \quad (4.17)$$

Denominando as formas discretizadas em 4.15, 4.16 e 4.17 de A, B e C, respectivamente, substituindo as derivadas discretizadas na Equação 4.9 e isolando a concentração no tempo avançado, chega-se a equação discretizada:

$$C_{i,j,m}^{k+1} = \Delta t (A + B + C) + C_{i,j,m}^k \quad (4.18)$$

4.1.3 – Condição de convergência

A resolução numérica da equação da difusão requer uma série de informações referentes as concentrações iniciais, concentrações nas fronteiras do sistema, espaçamento da malha (Δx) e

coeficiente de difusão no meio poroso (D), que normalmente são informadas diretamente. O passo no tempo (Δt), contudo, é determinado indiretamente, de forma que seja respeitada a condição de convergência do método explícito. A condição de convergência para esta equação é dada pela seguinte expressão:

$$D \frac{\lambda}{dx} < 0.5 \quad (4.19)$$

sendo

$$\lambda = \frac{dt}{dx} \quad (4.20)$$

Desta forma, o valor de λ , e conseqüentemente o passo no tempo, podem variar de acordo com o coeficiente de difusão e o espaçamento da malha.

No simulador construído foram programados intervalos de espaçamento de malha de forma que, arbitrando um coeficiente de difusão máximo, é calculado o valor de λ e, a partir deste, o passo no tempo. Neste caso é considerado o menor valor entre o passo em x/y e o passo em z , permitindo que a condição de convergência seja respeitada para ambos espaçamentos (h e h_z).

4.1.4 – Comentários sobre o método numérico

O tipo de resolução numérica adotado no simulador é chamado de método explícito. Neste método, para calcular a concentração em um determinado ponto no tempo seguinte, é necessário conhecer a concentração deste ponto, e de seus vizinhos, no tempo atual (Figuras 4.1 e 4.2).

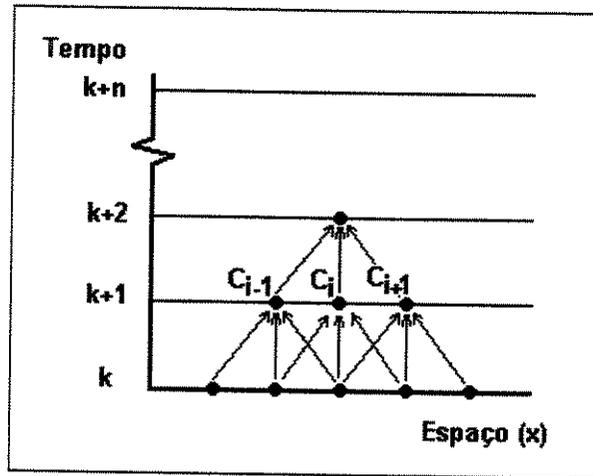


Figura 4.1: Desenho ilustrativo do cálculo da concentração no tempo e no espaço através do método explícito, em um modelo unidimensional.

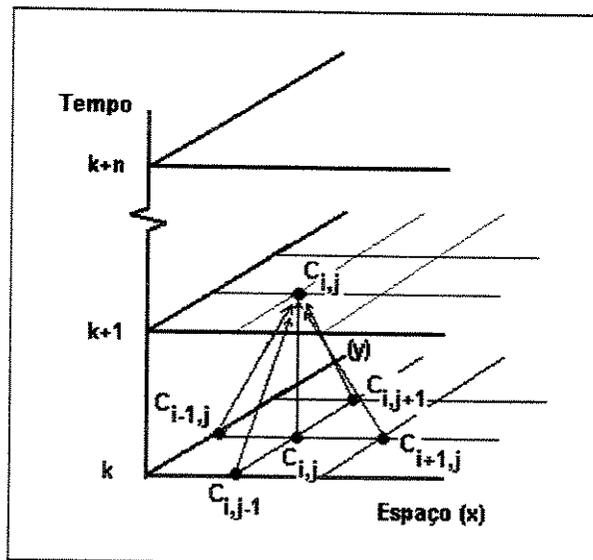


Figura 4.2: Desenho ilustrativo do cálculo da concentração no tempo e no espaço através do método explícito, em um modelo bidimensional.

Em um modelo tridimensional, o desenho ilustrativo do cálculo da concentração fica mais complexo, contudo, pode-se perceber que neste caso a concentração no tempo seguinte, além dos pontos laterais, também será função dos pontos localizados imediatamente acima e abaixo do ponto de cálculo.

4.2 – Modelo de Simulação

Conforme comentado no início deste capítulo, uma das grandes vantagens do simulador é possibilitar o posicionamento das fontes ou condições de contorno em qualquer célula da malha, permitir diferentes condições iniciais ao longo do sistema e atribuir células nulas no seu interior. Contudo, para que isto seja possível, além dos dados gerais referentes às dimensões do sistema, é necessário informar ao programa algumas informações características de cada célula do modelo. Basicamente, estas informações referem-se à condição de cálculo e ao valor de concentração inicial por célula.

Desta forma, as informações referentes à condição de cálculo foram batizadas de *Matriz Status*, enquanto que as informações a respeito das condições iniciais de *Matriz de Condições Iniciais*. Na primeira matriz, cada célula da malha recebe um valor igual a 0, 1 ou 2, indicando, respectivamente, se a célula é nula, representativa de uma condição de contorno (fonte) ou se é uma célula de cálculo. Salienta-se que as células fonte apresentam valor de concentração constante ao longo de todo o período, enquanto que nas células de cálculo a concentração varia no tempo. Na segunda matriz, como sugere o nome, são atribuídas as concentrações iniciais (tempo zero) para cada célula da malha (Figura 4.3).

Matriz Status	Matriz de Condições Iniciais
0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0
0 2 1 2 2 0	0 35 330 35 35 0
0 2 2 2 2 0	0 35 35 35 35 0
0 2 2 2 2 0	0 35 35 35 35 0
0 2 2 2 2 0	0 35 35 35 35 0
0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0
0 - célula nula	concentrações (g/L)
1 - célula fonte	
2 - célula de cálculo	

Figura 4.3: Exemplo de *Matriz Status* e *Matriz de Condições Iniciais* para uma malha efetiva de 4x4.

Na Figura 4.3 também é possível observar que a *Matriz Status* exemplificada apresenta um envoltório de células nulas, configurando uma malha real de 6x6 e uma malha efetiva de 4x4. Este procedimento na construção da matriz tem por objetivo possibilitar o cálculo das derivadas parciais na borda da malha efetiva. Na *Matriz de Condições Iniciais*, embora também tenha sido feito este envoltório, somente são consideradas no cálculo as concentrações da malha efetiva.

Em modelos tridimensionais, deve ser construída uma matriz de cada tipo, para cada camada da malha. No caso de meios heterogêneos e anisotrópicos na direção vertical, além das matrizes *status* e de condições iniciais, é necessário informar ao simulador matrizes de coeficientes de difusão horizontal e vertical.

A forma como a equação da difusão discretizada foi escrita, na subrotina de cálculo do simulador, permite optar entre 5 tipos distintos de meios, são eles: homogêneo, homogêneo com fator de anisotropia vertical, heterogêneo, heterogêneo com fator de anisotropia vertical e heterogêneo anisotrópico na vertical.

4.3 – Características e Lógica do Simulador

Nesta seção são apresentados os principais aspectos referentes às características e à lógica do simulador, sem a pretensão de servir como um guia de usuário. Basicamente, são comentados a forma de entrada e saída de dados, as opções de visualização gráfica, o funcionamento da rotina de cálculo das concentrações e a opção de balanço de massa de NaCl. Um fluxograma simplificado representando o algoritmo do programa é apresentado no final do capítulo (Figura 4.11).

4.3.1 – Entrada de dados

A entrada de dados do simulador é feita tanto via teclado como através de arquivos no formato texto. As informações básicas referentes ao sistema modelado, como o número de células nas direções x , y e z , as dimensões das células em x/y e z , o número de tempos para observação

dos resultados, os tempos de observação e também a opção de escolha a respeito das características do meio, são informados via teclado. O coeficiente de difusão do meio poroso é informado via teclado, no caso de meios homogêneos (coeficiente constante), ou através de arquivos texto, no caso de meios heterogêneos (coeficiente variável). As condições iniciais e de cálculo das células entram via arquivo texto.

Com o objetivo de verificar os dados de entrada, o programa gera automaticamente arquivos de conferência do modelo tridimensional para as matrizes *status*, condições iniciais, coeficientes de difusão e coeficientes de difusão vertical.

4.3.2 – Rotina de cálculo

A rotina de cálculo do simulador consiste basicamente na determinação da concentração em cada célula da malha (espaço *xyz*), a cada passo de tempo. Quando um determinado passo no tempo coincidir com um tempo selecionado para observação, a variável contendo a matriz de concentrações é copiada para uma variável de concentração de exibição.

No processo de cálculo, o programa inicialmente testa o *status* da célula. Quando for uma célula fonte, a concentração anterior é copiada para o tempo seguinte e, quando for uma célula de cálculo, o programa chama uma subrotina contendo a equação da difusão discretizada e calcula um novo valor de concentração. Este procedimento é repetido a cada passo no tempo até que seja alcançado o último tempo de observação escolhido.

Na subrotina de cálculo são analisadas todas as possibilidades de vizinhança entre células ativas e células nulas, de forma que seja possível o cálculo da concentração nos cantos da malha e também a inserção de células nulas no interior do modelo. Nos casos de célula de cálculo adjacente à célula nula, a derivada parcial entre as duas, seja da concentração ou do coeficiente de difusão, é considerada zero. Na Figura 4.4 estão representadas as 16 possibilidades de vizinhança entre células ativas e nulas existentes em um modelo bidimensional. No modelo tridimensional estas possibilidades aumentam para 64.

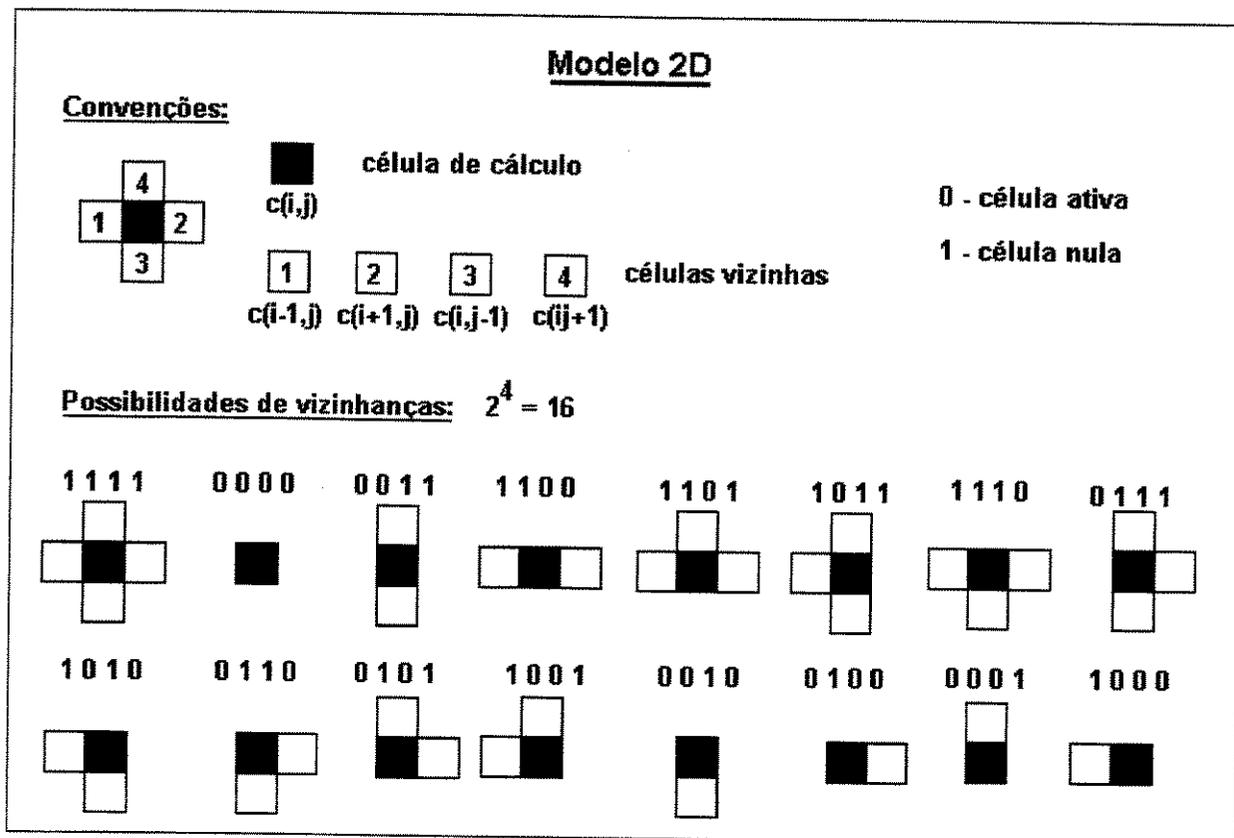


Figura 4.4: Desenho esquemático da possibilidade de vizinhanças entre células de cálculo e células nulas em um modelo bidimensional.

4.3.3 – Saída de dados

Para visualização dos resultados da simulação foram desenvolvidos três formatos de saída de dados que são escritos em arquivos distintos, são eles: formato padrão, formato *xyz* e formato *results*.

No formato de saída padrão, além das matrizes de concentrações calculadas para cada camada, em cada tempo de observação, é apresentado um cabeçalho contendo os dados gerais da simulação. Neste arquivo, as matrizes de saída estão prontas para serem visualizadas em gráficos de superfície do aplicativo *Excel™* da *Microsoft*. A desvantagem deste tipo de visualização é a impossibilidade de trabalhar com malhas que apresentem células nulas no seu interior, uma vez que nestes casos os valores de concentração são considerados zero, distorcendo as imagens.

No segundo tipo de arquivo de saída, os dados de concentração são gerados em um formato *xyz*, adequado para ser carregado em aplicativos como o *Surfer™* da *Golden Software*. A vantagem deste tipo de saída em relação ao anterior é a possibilidade de interpolar os valores das células nulas internas, minimizando o problema que ocorre no gráfico de superfície, embora este não seja o procedimento ideal.

No terceiro tipo de saída (*results*), os dados são tabelados em um formato apropriado para serem interpretados como uma determinada propriedade de reservatório, como por exemplo a permeabilidade, pelo simulador de escoamento *Imex™* da *CMG*. Neste caso, os resultados de saída do simulador de difusão são inseridos em um modelo de simulação (arquivo máscara) que é submetido no simulador de escoamento. Os resultados desta simulação podem ser visualizados através do pós-processador *Results 3D™* da *CMG*. Para a visualização em vários tempos, as matrizes geradas pelo simulador de difusão iônica podem ser inseridas como várias propriedades no arquivo máscara (permeabilidade i,j,k , transmissibilidade i,j,k). Uma observação importante, é que a matriz de um tempo qualquer da saída *results*, também deve ser inserida junto ao comando que define a razão reservatório/espessura total (*netgross*) no modelo máscara. Este procedimento permite que as células nulas da malha do simulador de difusão, também sejam nulas no simulador de fluxo. Neste caso, é importante comentar que não devem ser definidas células com concentrações zero no simulador de difusão, e sim com um valor infinitesimal (0,1 ou 0,01), para evitar que uma concentração zero seja interpretada como célula nula. A vantagem deste tipo de saída em relação aos anteriores, é possibilitar a visualização do campo de concentrações em qualquer tipo de malha.

Nas Figuras 4.5 a 4.8 estão ilustrados exemplos de cada um dos três tipos de saída comentados, para os mesmos dados de concentração. Nestes exemplos está representada uma malha de 20x10, com células nulas no seu interior.

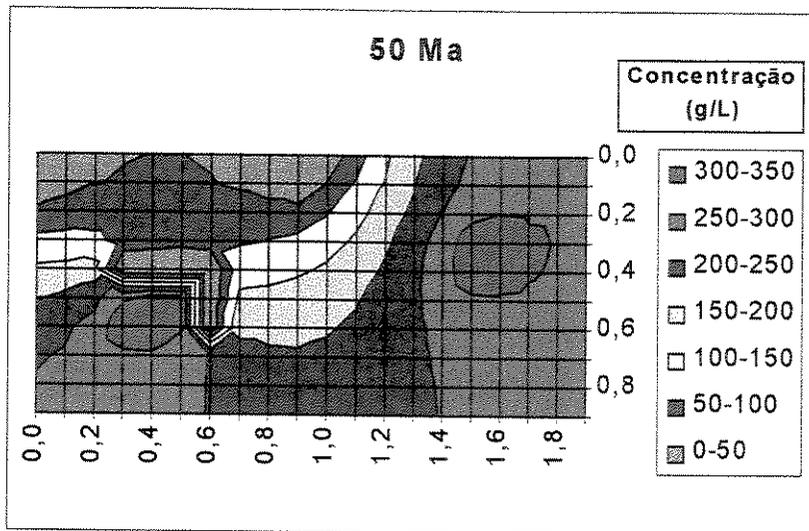


Figura 4.5: Visualização da variação da concentração em gráficos de superfície do aplicativo *Excel™*.
 Notar a deformação nas curvas de contorno causada pela presença de células nulas no interior da malha.

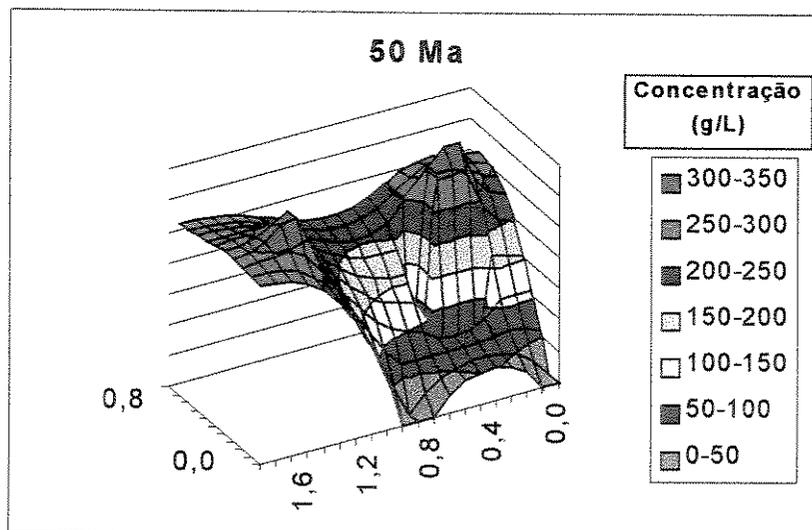


Figura 4.6: Visualização da variação da concentração em gráficos de superfície 3D do aplicativo *Excel™*.
 Notar a deformação nas curvas de contorno causada pela presença de células nulas no interior da malha.

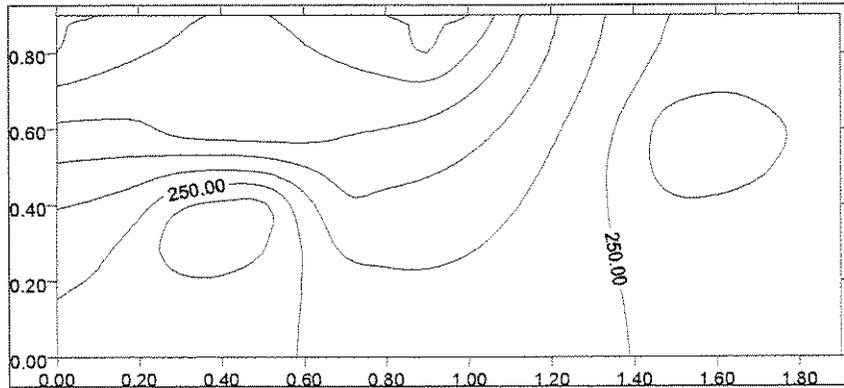


Figura 4.7: Visualização da variação da concentração em mapa gerado através do aplicativo *Surfer™*. Neste caso os dados da saída *xyz* foram *krigados* de forma que as células nulas aparecem com valores interpolados.

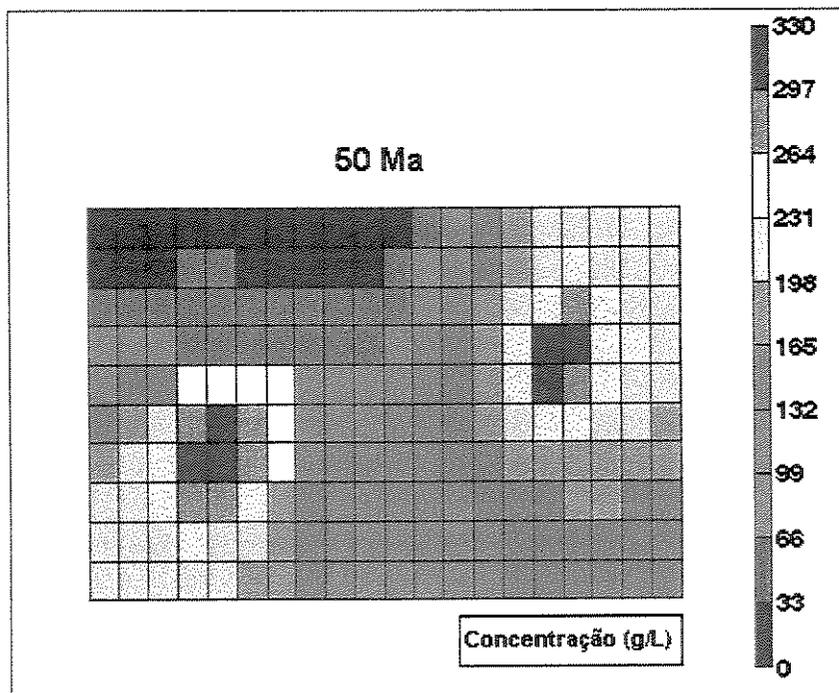


Figura 4.8: Visualização da variação da concentração em uma saída do pós-processador *Results 3D™*. Neste exemplo as células nulas são respeitadas e as concentrações expressas em escala de cores.

4.3.4 – Balanço de massa

O simulador de difusão iônica apresenta ainda uma opção para cálculo do balanço de massa de NaCl. O procedimento de cálculo consiste na determinação da variação da concentração média no reservatório entre um determinado tempo de observação e o tempo zero. O volume poroso total é calculado a partir do número total de células, dimensões das células e valores de porosidade média e razão reservatório/total média estimados para o reservatório. Sabendo-se qual a massa de NaCl foi incorporada ao reservatório, em um dado período, e a densidade do sal, calcula-se o volume de halita que é dissolvido e incorporado à água de formação, em cada tempo de observação. A Figura 4.9 ilustra um exemplo da saída do balanço de massa.

Balanço de Massa	
Layer : 1	Celulas ativas : 117
Layer : 2	Celulas ativas : 123
Layer : 3	Celulas ativas : 824
Layer : 4	Celulas ativas : 770
Layer : 5	Celulas ativas : 681
Layer : 6	Celulas ativas : 681
Layer : 7	Celulas ativas : 389
Layer : 8	Celulas ativas : 389
Celulas ativas totais :	3974
Obs: Desconsiderando celulas de condicao de contorno.	
Porosidade media do reservatorio (%) :	17.0
Razao reservatorio/total media :	.500
Volume poroso de reservatorio :	
40.5348 km3	.405E+11 m3
Tempo (Ma) :	.00
Concentracao media (g/L) :	72.0
Volume de Halita dissolvido e incorporado a agua de formacao :	
.0000 km3	.000E+00 m3
Tempo (Ma) :	114.00
Concentracao media (g/L) :	167.8
Volume de Halita dissolvido e incorporado a agua de formacao :	
1.8483 km3	.185E+10 m3

Figura 4.9: Exemplo de saída de dados da opção de balanço de massa do simulador de difusão iônica.

4.4 – Limitações do Simulador

Nestas seção são apresentadas algumas limitações identificadas no simulador de difusão iônica construído que, contudo, não inviabilizaram sua aplicação na modelagem numérica da salinização da água de formação.

- O simulador trabalha com um sistema de malha Cartesiano, com células de dimensões constantes ao longo de toda a malha, não permitindo refinamento. Dependendo do tipo de problema proposto, estas características podem inviabilizar a simulação.
- A condição definida para célula inicialmente (nula, fonte ou cálculo) não permite alteração no decorrer da simulação.
- Tendo em vista que o simulador foi construído com o objetivo de resolver um problema específico, em escala de bacia sedimentar e tempo geológico, as unidades das grandezas envolvidas estão preparadas para este tipo de situação, ou seja, tempo em milhões de anos e espaço em quilômetros. A sua aplicação, em qualquer outro problema, em escala diferente da citada requer uma adaptação do programa.

4.5 – Validação do Simulador

A validação de soluções numéricas de equações diferenciais normalmente é efetuada comparando-se os resultados com a solução analítica. Por este motivo está apresentado no Apêndice A a resolução analítica da equação da difusão iônica unidimensional, para meios homogêneos. O caso resolvido é representativo de um sistema infinito com concentração na fronteira interna constante, onde a solução é dada pela seguinte expressão:

$$C_D = \operatorname{erfc}\left(\frac{x_D}{2\sqrt{t_D}}\right) \quad (4.21)$$

Onde:

C_D – concentração adimensional

x_D – espaço adimensional

t_D – tempo adimensional

erfc – função erro complementar

A forma gráfica da função concentração é obtida substituindo a função erro complementar na equação 4.21. Este procedimento pode ser feito numericamente uma vez que a função *erfc* está disponível em aplicativos de matemática. Procedendo-se desta forma e convertendo as grandezas adimensionais em dimensionais, foi confeccionado o gráfico da Figura 4.10, onde a solução analítica está representada conjuntamente com a solução numérica, validando o simulador de difusão.

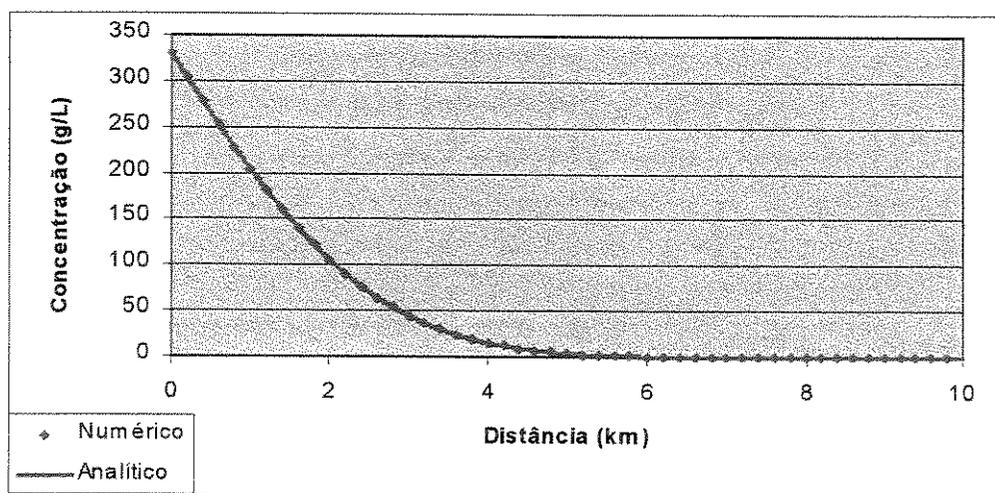


Figura 4.10: Gráfico de concentração *versus* distância confrontando os resultados obtidos analítica e numericamente.

Os dados utilizados nesta modelagem foram: coeficiente de difusão no meio poroso de $5,6 \times 10^{-6}$ cm²/s, concentração na fronteira interna igual a 330 g/L, concentração inicial igual a 0 g/L, comprimento do sistema de 10 km e tempo de observação de 114 Ma.

Capítulo 5

Modelagem Numérica da Salinização da Água de Formação

Neste capítulo é apresentada a modelagem numérica da salinização da água do Membro Carmópolis através de difusão iônica. As relações espaciais e temporais dos eventos que permitiram a formulação deste sistema termodinâmico são estabelecidas com base no modelo geológico de salinização apresentado no Capítulo 3. Os resultados modelados são apresentados para os tempos de 10, 30, 60, 90 e 114 Ma decorridos após o início do processo. Desta forma, quando descreve-se o tempo zero, está se referindo às condições iniciais do problema, no Neoptiano, há 114 Ma atrás, e quando descreve-se o tempo 114 Ma, está se referindo ao tempo atual.

Tendo em vista o comportamento conservativo do íon cloreto em solução e a sua relação linear com o íon sódio na faixa de salinidade trabalhada (Figura 3.16), em todas as simulações é utilizado o coeficiente de difusão deste íon e assumido que os cloretos são neutralizados exclusivamente pelo sódio, definindo a salinidade da água. Assim, todas as concentrações reportadas estão expressas em termos de NaCl equivalente.

5.1 – Considerações Sobre as Condições Iniciais e de Contorno

Conforme comentado, as condições iniciais e de contorno do sistema representado pelo Membro Carmópolis são formuladas com base no modelo geológico de salinização da água de formação. Desta forma, em porções da bacia interpretadas como regiões mais elevadas na época da deposição do Carmópolis, admite-se que a concentração inicial da água fosse próxima de zero,

compatível com a da água singenética do ambiente sedimentar. Já em porções sob influência marinha, esta concentração apresentaria valores característicos da água do mar (~35 g/L). Em regiões no interior da bacia, onde foi implantado o ambiente evaporítico e concluiu-se que a água teria sofrido um processo de pré-salinização, é bastante provável que a concentração inicial tenha atingido valores bem mais elevados, da ordem de dezenas de gramas por litro.

Em relação às condições de contorno, é razoável admitir que, em algumas porções localizadas junto à borda da bacia, onde imagina-se que em maior ou menor escala sempre existiu influência de água meteórica, a salinidade da água tenha permanecido próxima de zero durante todo o tempo. Já na fronteira dos sais solúveis, é esperada uma salinidade compatível com a concentração de equilíbrio termodinâmico da halita com a água. Este valor foi calculado através do aplicativo *Solmineq88* e equivale a aproximadamente 330 g/L (Tabela 5.1).

Tabela 5.1: Especificação do NaCl dissolvido na água, na concentração de saturação com halita, calculado através do aplicativo *Solmineq88*.

Íon	Na ⁺	Cl ⁻	NaCl ^o	TSD
Teor (g/L)	79,640	122,900	125,500	328,040

5.2 – Considerações Sobre o Coeficiente de Difusão

Os coeficientes de difusão no meio poroso utilizados nas simulações realizadas neste trabalho foram determinados com base no coeficiente do íon cloreto, desprezando-se os efeitos de íon-par e interações elétricas. O cálculo da tortuosidade do sedimento, para efeito de transformação do coeficiente em solução aquosa para o meio poroso (Equação 2.11), foi elaborado de acordo com o gráfico de fator de formação *versus* porosidade do reservatório Carmópolis, característico de um determinado campo da bacia (Figura 5.1).

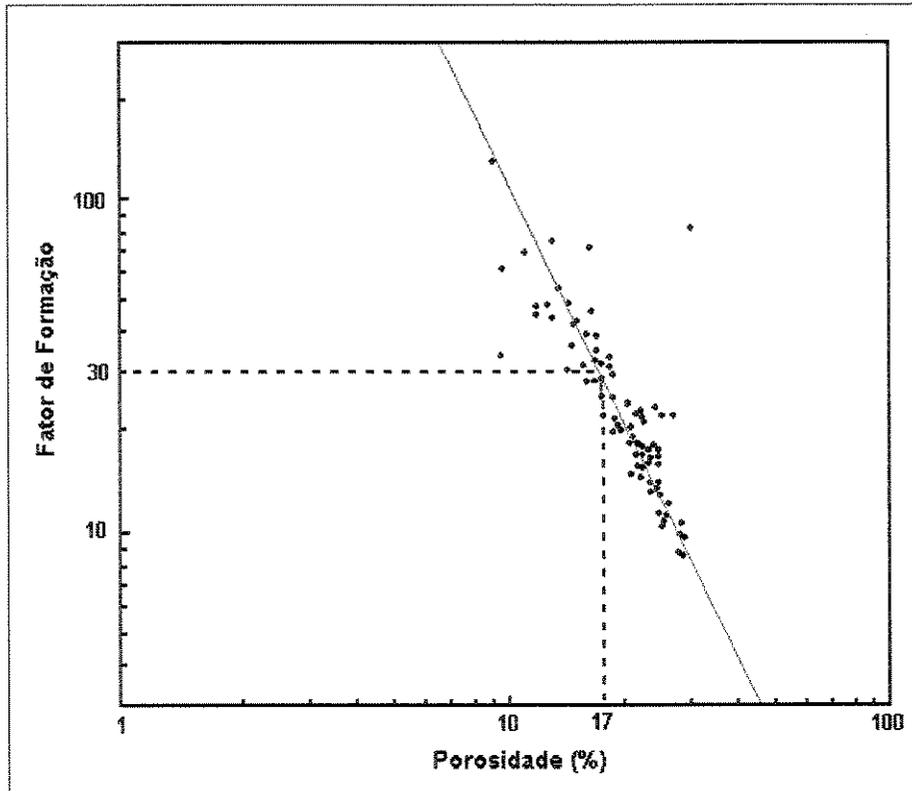


Figura 5.1: Gráfico do fator de formação *versus* porosidade do reservatório Carmópolis, característico de um determinado campo da bacia (Elias, 1998).

Assumindo-se uma porosidade constante e igual a 17% para toda unidade, a tortuosidade foi determinada através da relação de McDuff e Ellis (1979)

$$\theta^2 = FF * \phi \tag{5.1}$$

Onde:

θ - tortuosidade do meio poroso

FF – fator de formação

ϕ - porosidade

obtendo-se um valor 2,26.

Considerando um gradiente geotérmico médio de 31,3 °C/km (Figura 5.2) e uma relação linear do coeficiente de difusão com a temperatura (Figura 5.3), os coeficientes de difusão no meio poroso foram corrigidos para efeito da temperatura, de acordo com a profundidade do reservatório.

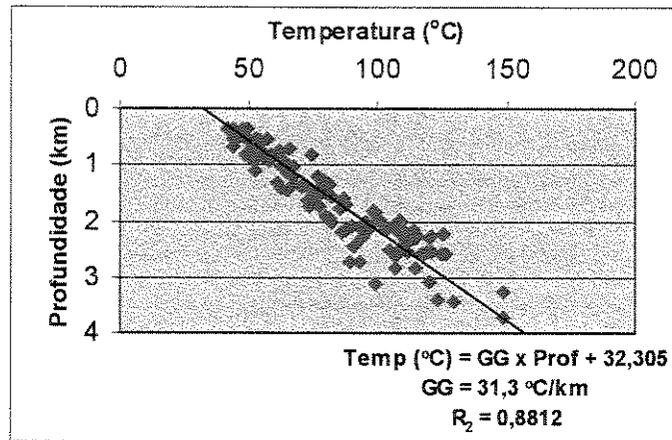


Figura 5.2: Gradiente geotérmico médio na área de ocorrência do Membro Carmópolis, de acordo com os dados apresentados por De Gasperi (1994).

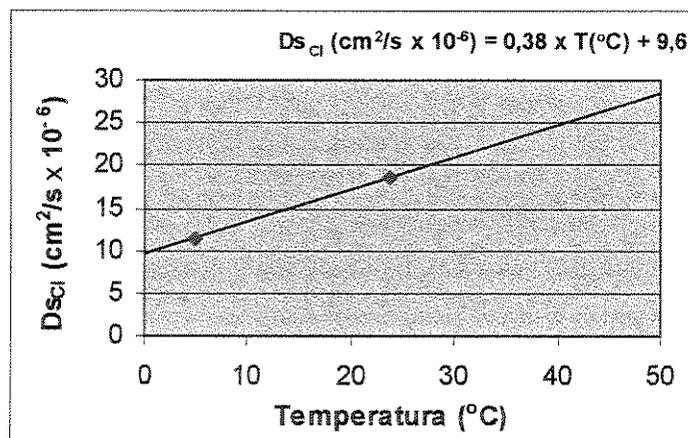


Figura 5.3: Variação linear do coeficiente de difusão do íon cloreto com a temperatura, com base nos valores apresentados por Berner (1980).

Desta forma, os coeficientes de difusão no meio poroso variaram entre $4,7 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, nas porções mais rasas do sistema, e $11,5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, nas partes mais profundas.

5.3 – Simulação Unidimensional

A simulação unidimensional da salinização da água do Membro Carmópolis foi realizada a partir de um programa previamente elaborado que resolve a equação da difusão para meios homogêneos, em uma dimensão. O objetivo principal desta simulação foi testar as condições iniciais e de contorno modeladas geologicamente. Para isto foram selecionadas duas áreas com perfis de salinidade distintos, representando regiões onde são esperadas diferentes condições iniciais e de contorno do problema. Uma das áreas está localizada junto à borda da bacia, onde existe infiltração de água meteórica e não muito distante ocorrem pacotes de sais solúveis na unidade sobreposta (perfil 1). A outra área está posicionada em uma porção no interior da bacia, onde admite-se que a água de formação tenha sofrido o processo de pré-salinização. Nesta área também ocorrem sais solúveis, contudo não existe influência de água meteórica (perfil 2). A localização dos perfis pode ser visualizada no mapa de isossalinidade (Figura 3.6).

5.3.1 – Área de borda da bacia

Para área de borda da bacia foram realizadas duas simulações. Em um primeiro caso, foi simulado um sistema com uma fonte de 330 g/L na fronteira interna e outra de 0 g/L na fronteira externa, representando, respectivamente, os sais solúveis e a infiltração de água meteórica. Neste caso foi considerada uma concentração inicial zero e um meio homogêneo com coeficiente de difusão de $5,6 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$.

Conforme pode-se observar no gráfico da Figura 5.4, o perfil medido é característico de um regime permanente que, para as condições modeladas, foi alcançado após decorrido um período de aproximadamente 60 Ma. Este resultado indica que o perfil atual tem mantido-se estabilizado nos últimos 54 Ma, caso as condições tenham permanecido constantes. Seria problemático explicar este problema através de difusão iônica se fosse necessário um tempo maior que 114 Ma para o perfil medido ser atingido, uma vez que o sistema tem esta idade.

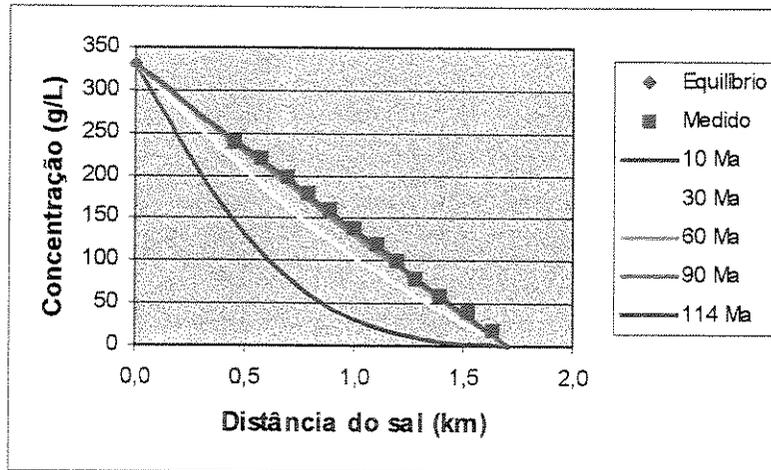


Figura 5.4: Perfil de difusão iônica simulado para uma área de borda da bacia, considerando condições iniciais e de contorno coerentes com o modelo geológico de salinização.

Com o objetivo de confirmar a presença de água meteórica na borda da bacia, foi testada uma outra hipótese, onde considerou-se as mesmas condições do caso anterior, exceto a fonte zero na fronteira externa, que foi retirada. Os perfis simulados (Figura 5.5) mostram que caso não houvesse recarga de água doce na borda, o processo de salinização nesta área deveria estar muito mais evoluído, o que não ocorre.

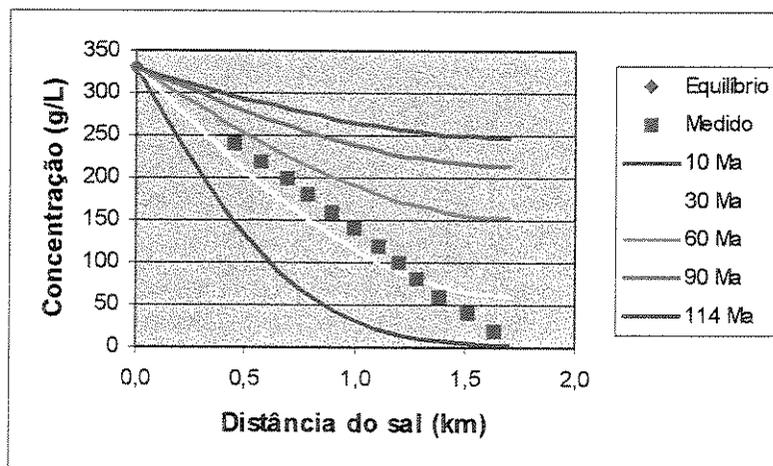


Figura 5.5: Perfil de difusão iônica simulado para uma área de borda da bacia, considerando uma condição de contorno externo incompatível com o modelo de salinização.

5.3.2 – Área no interior da bacia

Na área localizada no interior da bacia foram feitas várias simulações, com diferentes valores de concentração no tempo zero, com o objetivo de testar o modelo de pré-salinização e calibrar as condições iniciais. Inicialmente foi simulado um sistema com uma fonte de 330 g/L na fronteira interna, concentração inicial zero e meio homogêneo com coeficiente de difusão de $7,0 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$. Conforme mostra o gráfico da Figura 5.6, o perfil medido está longe de ser atingido, corroborando a hipótese de pré-salinização da água.

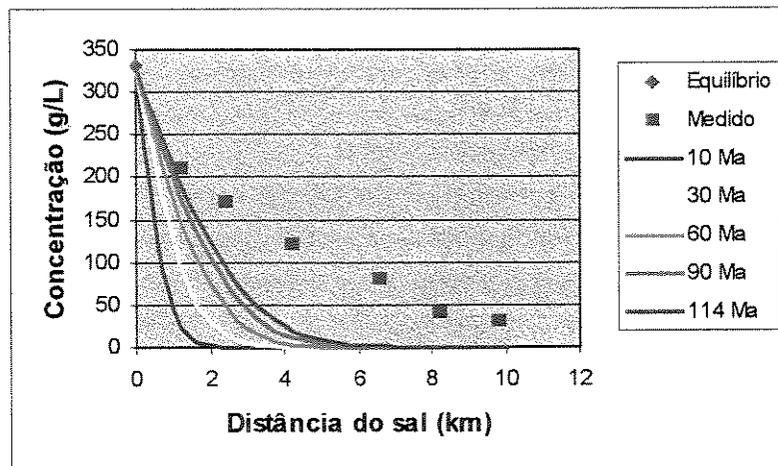


Figura 5.6: Perfil de difusão iônica simulado para uma área no interior da bacia, considerando uma concentração inicial de 0 g/L, incompatível com o modelo de salinização.

Posteriormente, o mesmo caso foi simulado para diferentes condições iniciais, gerando perfis de difusão bem mais próximos do perfil medido e indicando que a água de formação poderia apresentar concentrações iniciais tão elevadas quanto 100 g/L (Figura 5.7).

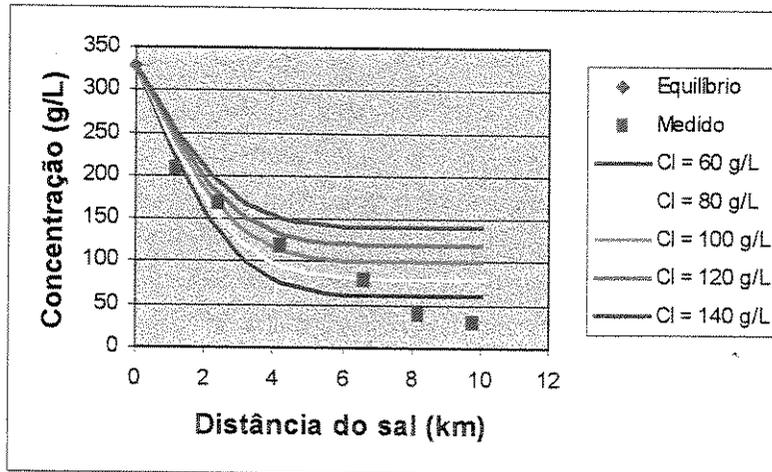


Figura 5.7: Perfis de difusão iônica simulados para uma área no interior da bacia, considerando diferentes condições iniciais, após decorridos 114 Ma.

Considerando a concentração de 100 g/L como uma boa aproximação para as condições iniciais, o mesmo caso foi simulado novamente para vários tempos (Figura 5.8). A discrepância verificada entre as curvas medida e simulada, a partir da distância de 5 km da fonte, foi atribuída a variações nas condições iniciais ao longo do sistema, não consideradas na simulação, ou mesmo a efeitos de sobreposição de outras condições de contorno, uma vez que a distância envolvida é muito extensa.

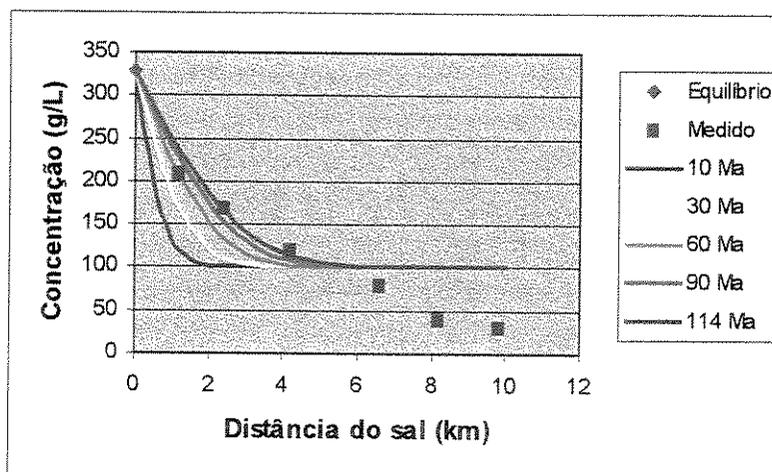


Figura 5.8: Perfil de difusão iônica simulado para uma área no interior da bacia, considerando uma concentração inicial de 100 g/L.

A análise dos resultados obtidos na simulação unidimensional da salinização da água permitiu concluir que, para um melhor entendimento deste tipo de problema, é necessário a elaboração de um modelo que proporcione uma melhor representação espacial do sistema, para ser simulado em duas ou três dimensões.

5.4 – Simulação Tridimensional

Para realizar a simulação tridimensional da salinização da água do Membro Carmópolis foi utilizado o simulador de difusão iônica construído especificamente para este fim (Capítulo 4). O objetivo principal desta simulação foi reproduzir numericamente a evolução da salinidade da água desta unidade ao longo do tempo geológico, a partir das condições iniciais e de contorno previamente calibradas através da simulação unidimensional.

5.4.1 – Elaboração do modelo numérico

A simulação tridimensional da salinização da água de formação requer a elaboração de um modelo numérico que represente este sistema. Basicamente, este modelo deve ser representativo da geometria da unidade, das suas condições iniciais (concentração no tempo zero) e de contorno (posição espacial das fontes) e também dos coeficientes de difusão ao longo do sistema. A conjugação de todos estes fatores é que proporcionará a evolução da concentração ao longo do tempo.

A configuração da malha de simulação foi definida de forma que fosse representada a mesma geometria de reservatório elaborada para a modelagem da migração secundária de hidrocarbonetos (Capítulo 6). Desta forma, foi confeccionada uma malha de 55x38x8, com células de 2000x2000x30 metros, nas direções x , y e z , respectivamente. Salienta-se que as primeiras e últimas células nas direções x e y são nulas, de forma que a malha efetiva nestas direções é de 53x36. Espacialmente, esta malha está orientada conforme ilustrado na Figura 5.9.

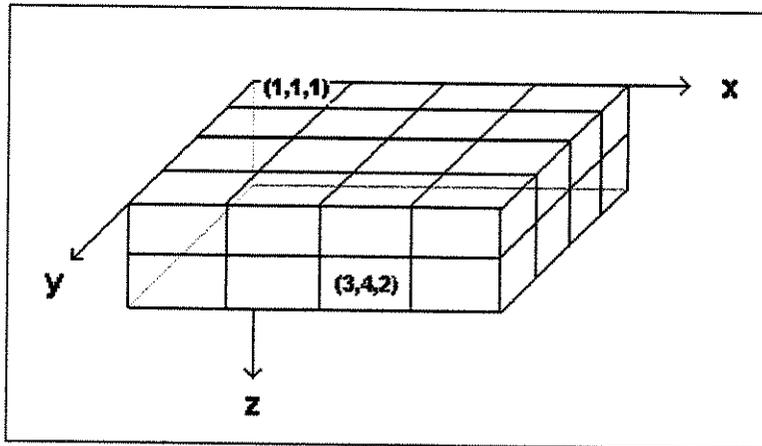


Figura 5.9: Figura ilustrativa da orientação da malha preparada para simulação tridimensional da salinização.

Na direção vertical o modelo elaborado é composto por 8 camadas, sendo as duas superiores (camadas 1 e 2) construídas especificamente para o posicionamento das fontes (*camadas fonte*), e as 6 inferiores (camadas 3 a 8) para representar o reservatório propriamente dito (*camadas reservatório*). Para cada camada da malha foram preparados três arquivos, onde são alocadas as matrizes de *status* das células, de condições iniciais e de coeficientes de difusão.

Nas *camadas fonte* são posicionadas as condições de contorno do sistema, de acordo com a localização geográfica dos sais solúveis (Figura 3.5) e das entradas de água meteórica (Figura 3.10). A idéia básica de criar duas *camadas fonte* é tentar contornar uma limitação do simulador, que não permite o refinamento da malha. Espacialmente, o reservatório Carmópolis está separado dos sais solúveis por um folhelho muito contínuo, estando justaposto a este apenas nas zonas de falha (Figura 3.19). Como a difusão através do folhelho foi negligenciada, a difusão ocorre apenas através da falha. Desta forma, a dupla *camada fonte* constitui um artifício geométrico que permite representar a difusão através de uma área compatível com a área das falhas que conectam o sal com o reservatório.

Considerando que a superfície horizontal de uma célula (2000x2000 m) é exageradamente grande quando comparada com a área de contato real dos sais solúveis com o aquífero através das falhas, foi elaborada uma geometria que não permite a difusão vertical a partir das fontes. Esta

geometria consiste basicamente no posicionamento de células nulas imediatamente abaixo das células fonte e células de cálculo lateralmente posicionadas às células fonte, de forma que a difusão ocorra inicialmente na lateral, através de uma área compatível com a do contato sal-reservatório (2000x30 m) (Figura 5.10).

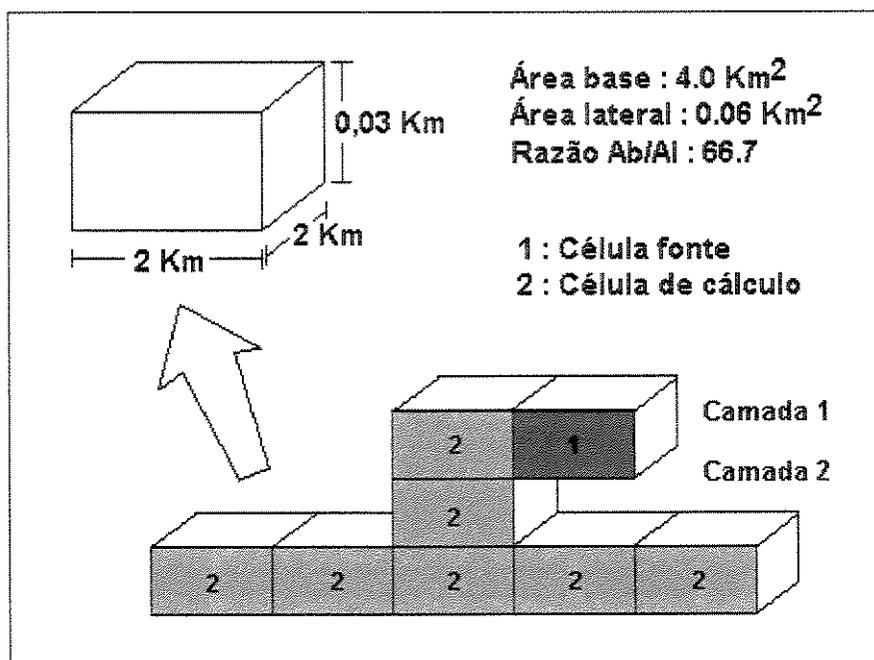


Figura 5.10: Desenho esquemático do artifício geométrico elaborado nas *camadas fonte* para propiciar uma área de difusão compatível com a área de contato sal-reservatório.

Desta forma, a matriz *status* da camada 1 é constituída por valores 0 (células nulas), 1 (células fonte) e 2 (células de cálculo), enquanto a matriz da camada 2 apenas por valores 0 e 2. Na matriz de condições iniciais, as células fonte recebem valor de 330 ou 0,1, dependendo se são fonte de sal ou de água doce, respectivamente, enquanto que as células de cálculo recebem valores de acordo com as condições iniciais previstas pelo modelo de salinização. As Figuras 5.11 e 5.12 ilustram, em planta e seção, os valores de condições iniciais das camadas 1 e 2, modelados para simulação. Observar que uma célula fonte na camada 1 equivale a uma célula nula no camada 2, com eventuais exceções no caso de fontes de água doce, onde foi permitida a difusão vertical.

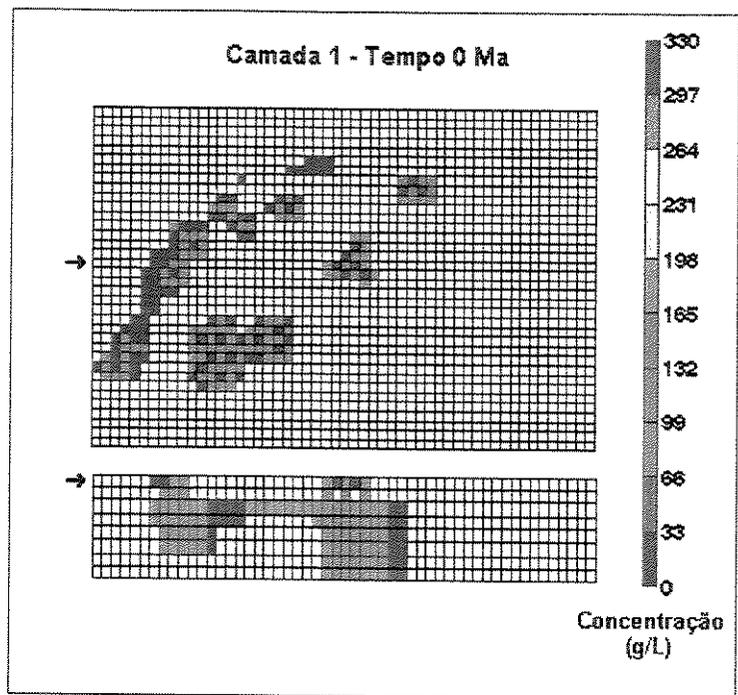


Figura 5.11: Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 1 e detalhe da seção xz17.

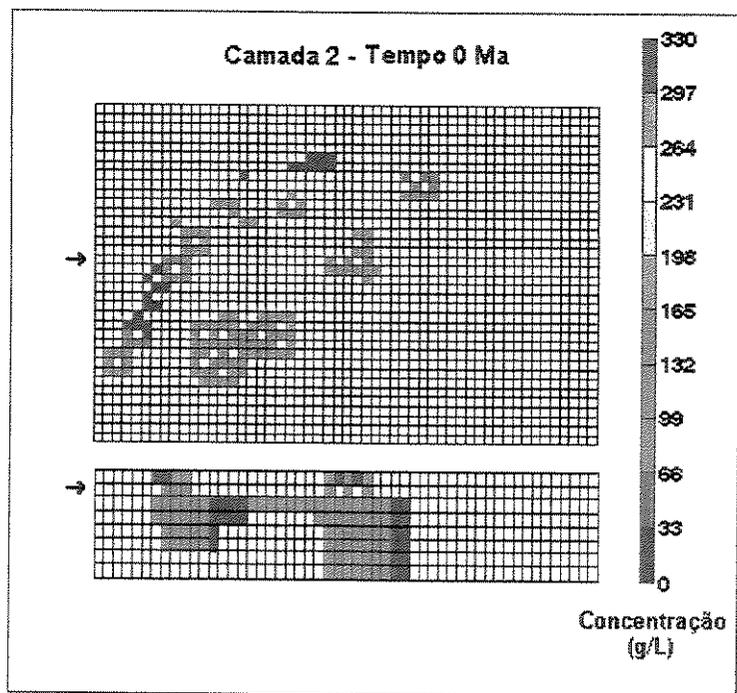


Figura 5.12: Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 2 e detalhe da seção xz17.

A preparação das matrizes *status* das *camadas reservatório* foi realizada com base na área de ocorrência do Membro Carmópolis. As células onde o Carmópolis está presente foi atribuído valor 2 e as demais valor 0. Para montar a matriz de condições iniciais, foi levado em consideração o mapa de isólitais de anidrita do Membro Ibura (Figura 3.4), uma vez que a área de ocorrência deste mineral permite inferir a extensão da bacia evaporítica e, conseqüentemente, a área onde a água do Carmópolis teria sofrido o processo de pré-salinização. Nesta área foi atribuído uma concentração inicial de 100 g/L, com base no valor calibrado para condição inicial através da simulação unidimensional (Figura 5.8). As regiões que possivelmente eram mais elevadas na época da deposição do Carmópolis foram consideradas com uma concentração inicial de 0,1 g/L e, em uma região restrita, no canto oeste da área, foi utilizada uma concentração inicial característica da água do mar 35 g/L.

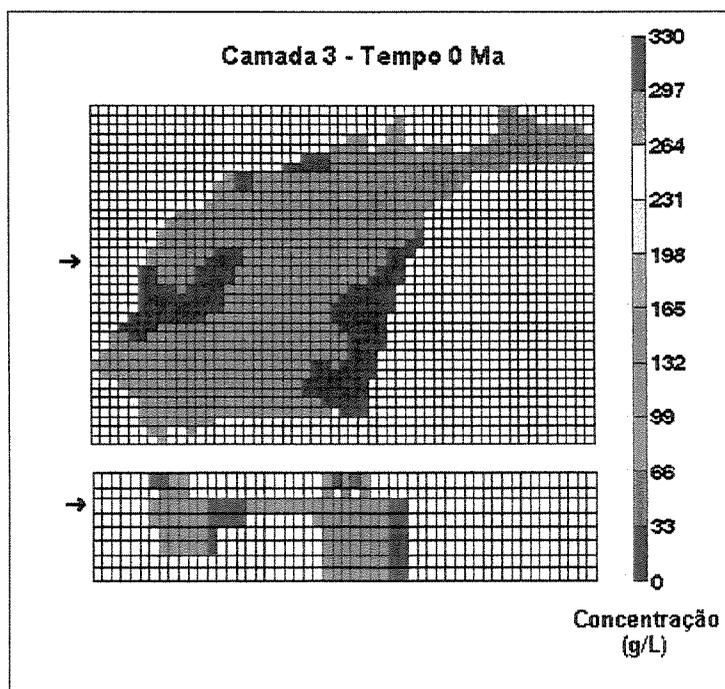


Figura 5.13: Mapa de salinidade simulado para o tempo zero, evidenciando as condições iniciais definidas para a camada 3 e detalhe da seção xz17.

Como o modelo elaborado supõe a existência de um meio heterogêneo, baseado na variação da temperatura e, conseqüentemente, do coeficiente de difusão no espaço, para cada camada também foi elaborada uma matriz de coeficientes de difusão. Para isto, foi elaborado um

programa que, a partir de um arquivo com dados de topo, do gradiente geotérmico médio da área, da relação de variação do coeficiente de difusão do íon cloreto com a temperatura, e da tortuosidade do meio poroso, gera automaticamente as matrizes contendo o coeficiente de difusão de cada célula. As relações entre profundidade, temperatura e coeficientes de difusão utilizadas estão detalhadas na Seção 5.2.

5.4.2 – Resultados obtidos

Neste item, basicamente são apresentados os resultados obtidos através da simulação tridimensional do modelo numérico preparado para representar o sistema de salinização da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis, através de difusão iônica. Na seqüência são apresentadas uma série de imagens que ilustram a evolução da salinidade da água de formação, em planta (camada 3) e seção (xz17), a partir de 10 Ma após o início do processo, até o presente (114 Ma) (Figuras 5.14 a 5.18). O tempo zero está representado na Figura 5.13.

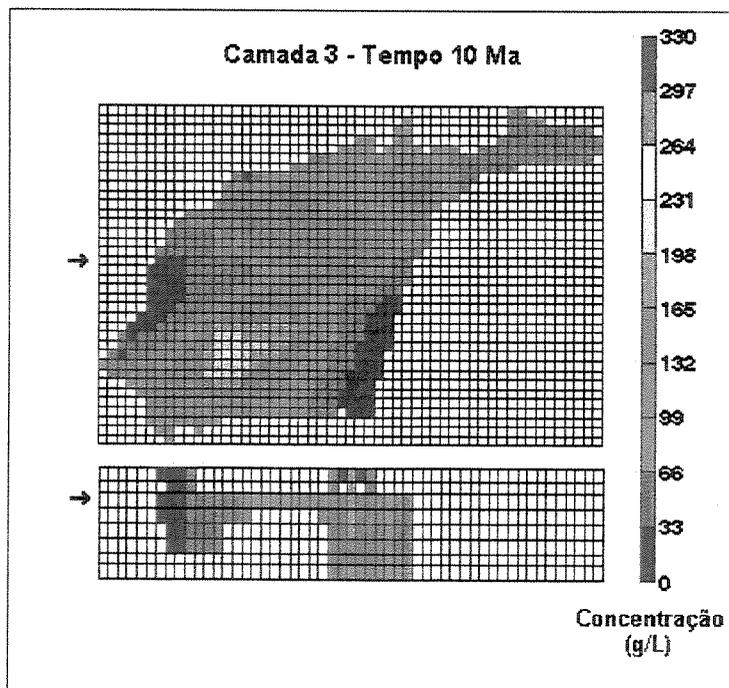


Figura 5.14: Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 10 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção xz17.

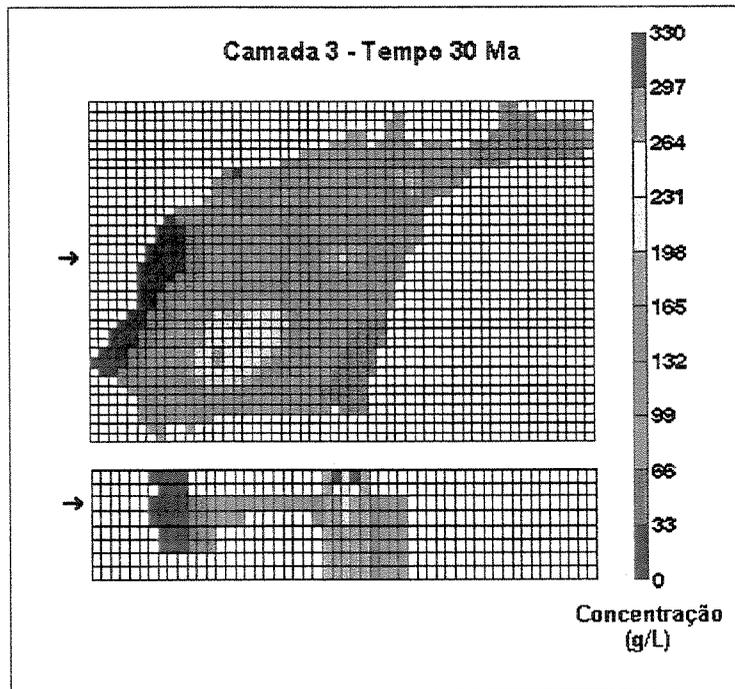


Figura 5.15: Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 30 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção xz17.

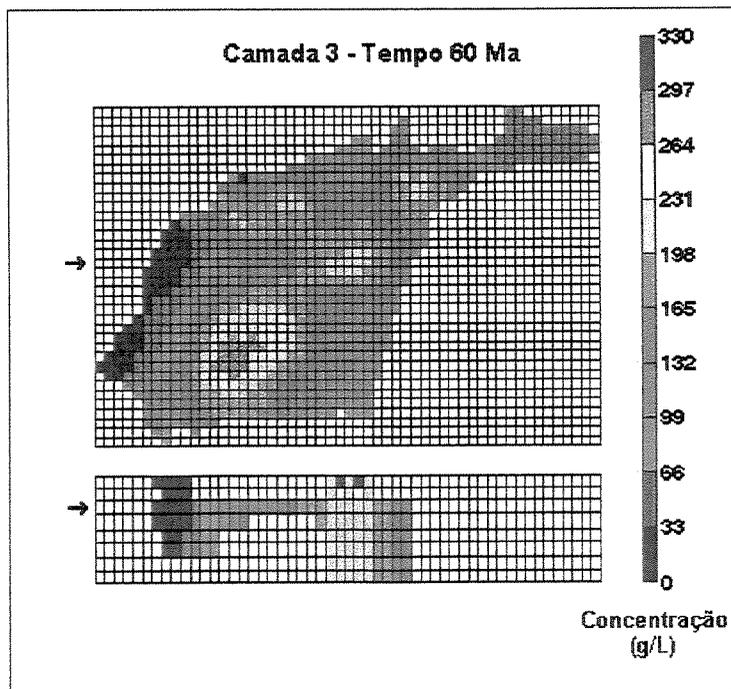


Figura 5.16: Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 60 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção xz17.

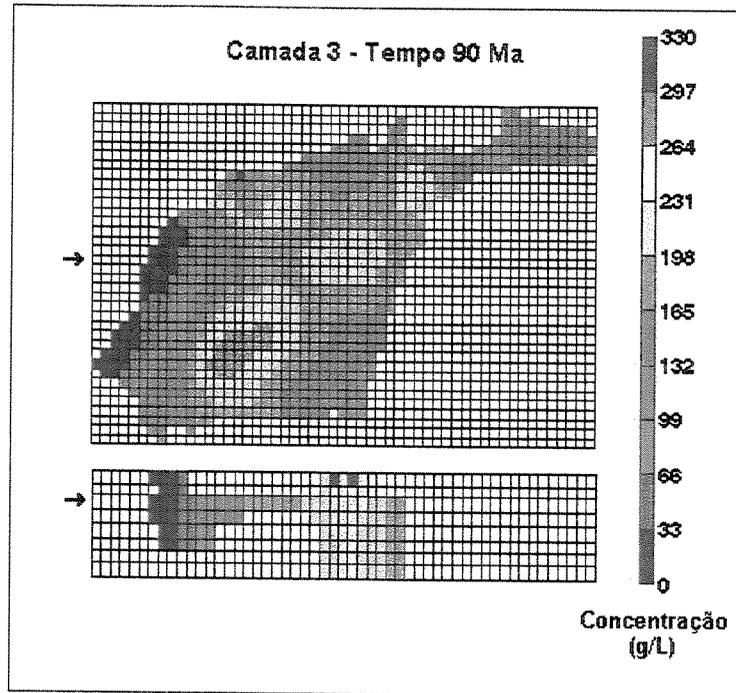


Figura 5.17: Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 90 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção $xz17$.

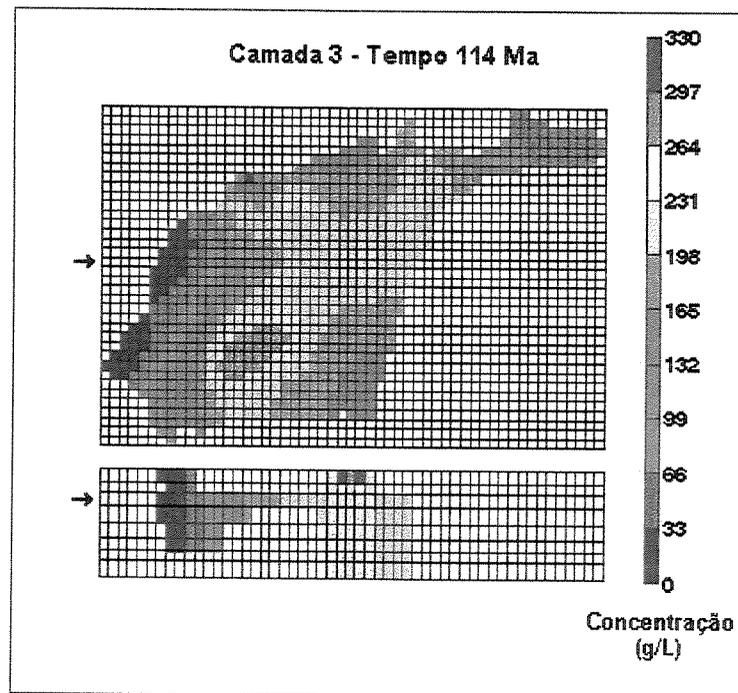


Figura 5.18: Mapa de salinidade simulado para a camada 3, decorridos 114 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção $xz17$.

5.4.3 – Análise dos resultados

As seções transversais apresentadas juntamente com os mapas nas Figuras 5.14 a 5.18 evidenciam uma notável semelhança nos valores de salinidade entre as diversas camadas. Esta constatação deve-se ao fato que a expressão areal do sistema é significativamente maior que a vertical, o que permite concluir que o modelo simulado poderia muito bem ser tratado como bidimensional. A opção de modelagem tridimensional foi adotada pela possibilidade de utilização da opção de balanço de massa de NaCl, disponível na versão 3D do simulador construído, em um modelo mais representativo da geometria do reservatório. Além disto, a simulação 3D também permite o posicionamento das fontes fora do reservatório, conferindo ao modelo uma maior semelhança com a realidade.

Nas figuras a seguir são apresentados, para comparação com a imagem simulada para o tempo atual (Figura 5.19), o mapa de salinidade (medido) redesenhado em escala de cores (Figura 5.20) e um mapa de residual, elaborado a partir das diferenças entre os dois anteriores (Figura 5.21). Nestas representações são mantidas as mesmas convenções de escala adotadas nas Figuras 5.11 a 5.18.

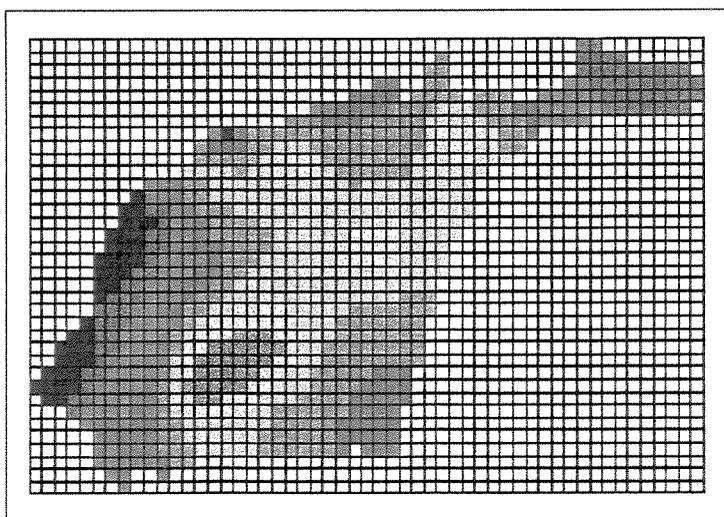


Figura 5.19: Mapa de salinidade simulado para o tempo atual (escala de cores igual a da Figura 5.18).

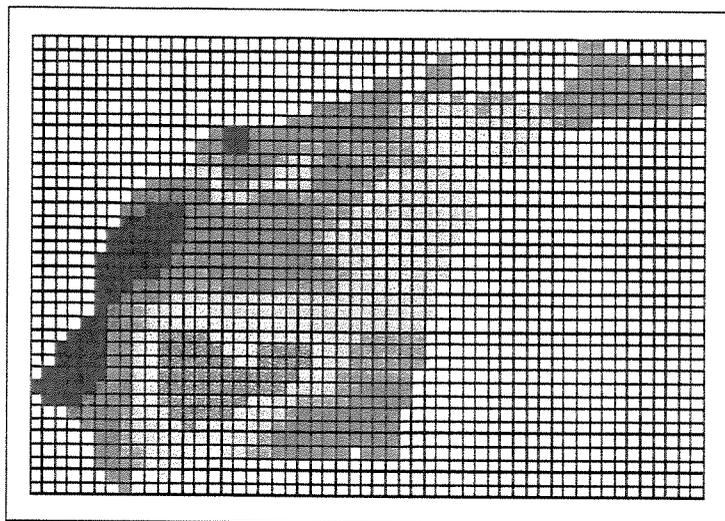


Figura 5.20: Mapa de salinidade medido (escala de cores igual a da Figura 5.18).

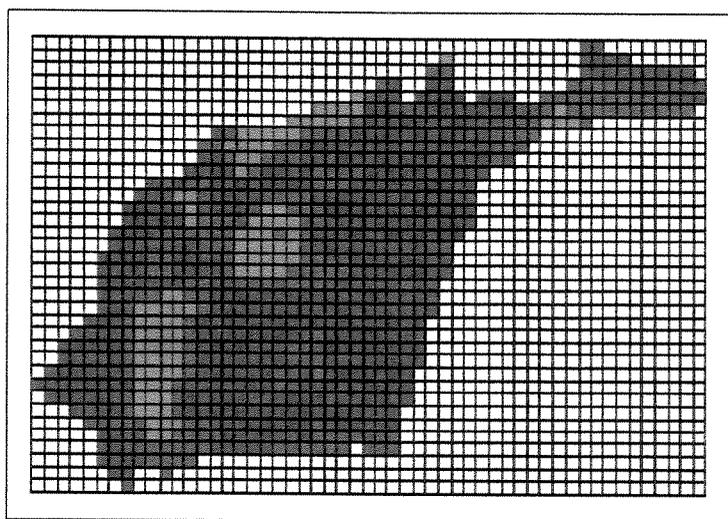


Figura 5.21: Mapa residual, evidenciando a diferença entre a salinidade mapeada e a simulada (escala de cores igual a da Figura 5.18).

Conforme pode-se observar, a simulação reproduziu satisfatoriamente a salinidade atual, corroborando o modelo de salinização proposto e confirmando os processos de dissolução de sal e difusão iônica, além das infiltrações localizadas de água meteórica, como os principais controladores da salinização da água de formação. Dadas as dimensões regionais e a escala de tempo geológico que o sistema foi tratado, o resultado alcançado é significativo.

5.4.4 – Análise crítica do modelo

As diferenças entre as imagens medida e simulada, representadas pelo mapa de resíduo, podem ser causadas por uma série de fatores, tanto relacionados às incertezas das variáveis envolvidas e às limitações na sua representação, como ao desconhecimento ou negligência de fenômenos físicos e geológicos que certamente devem ocorrer, mesmo não sendo preponderantes. A seguir são exemplificadas estas três classes de fatores.

Em relação as incertezas das variáveis envolvidas, destacam-se:

- A magnitude das concentrações iniciais inferidas através do modelo geológico de salinização e calibradas através da simulação unidimensional.
- A distribuição espacial dos diferentes valores de concentração inicial, também determinada com base no modelo geológico de salinização.
- A subjetividade no dimensionamento das fontes no modelo numérico.
- A variação do coeficiente de difusão no espaço por efeito da tortuosidade. Este foi considerado constante por desconhecimento.

Quanto as limitações na representação das variáveis destacam-se os seguintes fatores:

- O modelo numérico considera que as fontes são mantidas constantes ao longo de todo tempo, o que na realidade não é verdade, embora também não se conheça como estas variam.
- O modelo numérico considera que o coeficiente de difusão varia apenas no espaço, devido a variação da temperatura, embora também se saiba que a temperatura varia no tempo, tanto pelo decaimento do fluxo térmico como pela subsidência da bacia.

- O modelo numérico não considera os folhelhos intercalados no reservatório, que certamente apresentam um coeficiente de difusão muito menos elevado do que este.

Em relação ao desconhecimento ou negligência de fenômenos de natureza física e/ou geológica pode-se citar:

- Fluxo compactacional proveniente de unidades estratigráficas adjacentes.
- Infiltrações de água meteórica episódicas em áreas não reconhecidas.
- Difusão iônica entre o sal e o reservatório Carmópolis através de folhelhos.
- Fluxo gravitacional por efeito de aumento da densidade da água com a salinização.

De todos os fatores citados, evidentemente que os mais importantes são aqueles relacionados diretamente à difusão iônica, como a concentração inicial e o dimensionamento das fontes, uma vez que o modelo de salinização foi reproduzido através deste processo. A este respeito é interessante comentar que é possível melhorar o ajuste entre as duas imagens geradas alterando-se estes fatores. Contudo, um ajuste perfeito entre as duas imagens não significa necessariamente resultados mais próximos da realidade. O mapa de isossalidade, que serviu de gabarito para a simulação, também apresenta imperfeições, uma vez que este pode acumular incertezas de várias naturezas como: contaminação e análise de amostras, representatividade dos dados, até o método de confecção do mapa.

5.4.5 – Balanço de massa

Através da opção de balanço de massa de NaCl do simulador de difusão iônica foi calculado um volume de halita dissolvida e incorporada a água de formação de $1,85 \text{ km}^3$, decorridos 114 Ma após iniciado o processo. Este volume corresponde a cerca de 4,5% do volume de sal atual e considera apenas o sal removido para o aquífero Carmópolis. Para o tempo

zero foi calculada uma concentração média na água deste reservatório de 72 g/L e para o tempo atual 167,8 g/L. As concentrações para todos os tempos de observação selecionados podem ser vistas na Tabela 5.2 e na Figura 5.21, que mostra a evolução da salinidade média do reservatório no decorrer do tempo geológico. Para o cálculo do volume poroso foram contabilizadas 3974 células ativas, com porosidade média de 17 % e razão reservatório/total de 0,5, totalizando em 40,53 km³.

Tabela 5.2: Dados de concentração média da água de formação e volume de halita dissolvida ao longo do tempo geológico.

Tempo (Ma)	Concentração Média (g/L)	Volume de Halita Dissolvida (km ³)
0	72.0	0
10	87.5	0.30
30	109.9	0.73
60	135.4	1.22
90	155.1	1.60
114	167.8	1.85

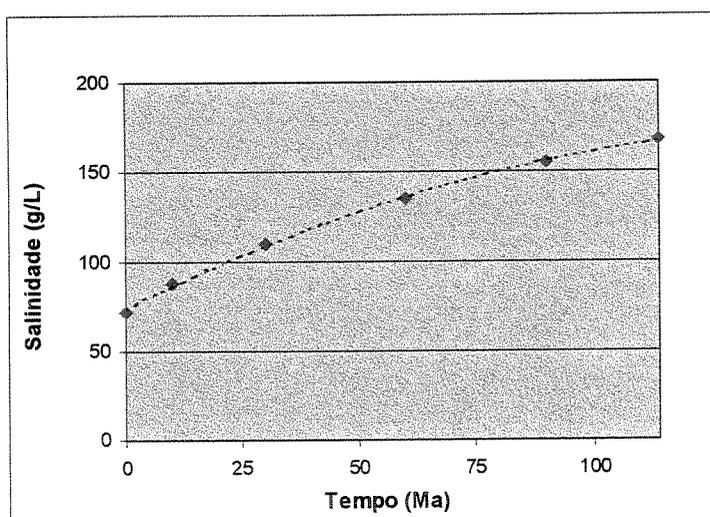


Figura 5.22: Gráfico de evolução da concentração média da água de formação ao longo do tempo geológico.

5.4.6 – Dificuldades encontradas e equipamentos utilizados

A principal dificuldade encontrada na etapa de simulação tridimensional da salinização consistiu no ajuste espacial e dimensional das fontes. Inicialmente este sistema foi modelado com 7 camadas, onde as fontes eram posicionadas imediatamente acima das camadas reservatório. Este procedimento invariavelmente gerou resultados onde o mapa simulado mostrava salinidade muito mais elevada que o mapa medido. Foram feitas várias tentativas de contornar este problema, seja restringindo o número de fontes ou mesmo diminuindo o coeficiente de difusão entre a camada fonte e a camada reservatório, sem obter evolução nos resultados. A simulação do mapa atual somente foi obtida quando desenvolvido o modelo de 8 camadas (Subseção 5.4.1). A Figura 5.23 ilustra o mapa simulado para um modelo de 7 camadas, considerando uma concentração inicial de 0,1 g/L para todas as células reservatório, após decorridos 114 Ma.

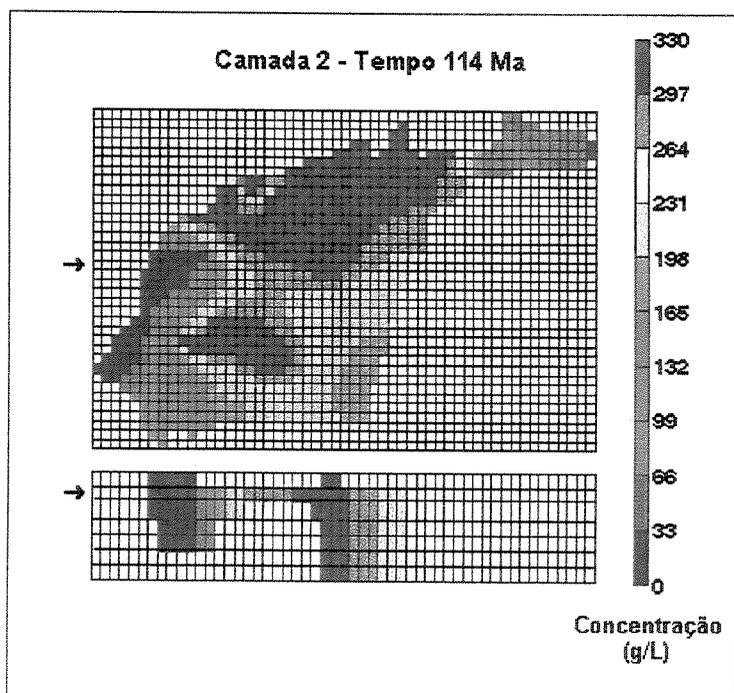


Figura 5.23: Mapa de salinidade simulado para a camada 2, em um modelo de 7 camadas com concentração inicial de 0,1 g/L, decorridos 114 Ma do início do processo. No detalhe, a variação da salinidade na seção xz17.

Todas as simulações foram realizadas em microcomputadores com processador *Pentium II* de 450 MHz e 128 Mb de memória RAM. O tempo de processamento de cada modelo oscilou entre 18 e 19 minutos. As imagens foram geradas no pós-processador *Results 3D™* da *CMG*, conforme detalhado no Capítulo 4.

Capítulo 6

Modelagem Numérica da Migração Secundária de Hidrocarbonetos

A migração secundária é definida como o deslocamento do petróleo através de rochas carreadoras, até a formação de uma acumulação de hidrocarbonetos. Os processos que controlam este fenômeno são as forças de flutuação do óleo e gás na rocha porosa saturada de água, as pressões capilares e o fluxo hidrodinâmico (Tissot e Welte, 1984). Neste estudo, onde é modelada a migração secundária no Membro Carmópolis, são considerados para efeito de simulação apenas as forças de flutuação. Como é admitido um comportamento hidrostático para esta unidade estratigráfica ao longo do tempo geológico e a molhabilidade à água deste reservatório não é nitidamente definida, as forças hidrodinâmicas e os efeitos capilares são desprezados.

Na elaboração do modelo numérico, as rochas reservatório, carreadoras e geradoras são representadas tridimensionalmente de modo a abranger a geometria do sistema petrolífero que engloba os campos produtores nesta unidade. A este respeito, é importante salientar que a posição espacial do sistema modelado tem mantido-se estável, pelo menos, desde o início do Terciário, quando o petróleo foi expulso das rochas geradoras e iniciou o processo de migração secundária (Rambo, 1999).

O principal objetivo de modelar a migração secundária é investigar a evolução espacial e temporal do petróleo no Membro Carmópolis, visando testar o modelo de migração (rotas do petróleo) e definir a ordem de grandeza do tempo necessário para o preenchimento das

acumulações. Para efeito de contagem do tempo na modelagem, o início da expulsão é considerado como o tempo zero da simulação.

6.1 – O Sistema Petrolífero da Bacia de Sergipe

Segundo Magoon e Dow (1994) um sistema petrolífero deve incluir todos os elementos essenciais e processos necessários para que as acumulações de óleo e gás possam existir. Dentre os elementos essenciais estão incluídas as rochas geradoras, rochas reservatórios, rochas selantes e rochas sobrepostas (soterramento), e entre os processos, a formação da armadilha (estrutura) e a geração-migração-acumulação do petróleo. Adicionalmente, todos os elementos devem estar adequadamente posicionados no tempo e no espaço de forma que os processos requeridos para formar uma acumulação possam ocorrer.

Tendo em vista a boa correlação dos biomarcadores dos óleos presentes nas acumulações do Membro Carmópolis com os dos extratos orgânicos amostrados ao longo da Formação Muribeca, o sistema petrolífero da Bacia de Sergipe (Sistema Muribeca-Carmópolis) é considerado bem configurado (Gaglianone *et al*, 1991, *apud* Hansi Jr., 1998). De acordo com este sistema, as rochas geradoras correspondem a seção Muribeca, de idade Alagoas Superior, localizada no Baixo do Mosqueiro, sendo as camadas carreadoras e os reservatórios compreendidos pelas rochas siliciclásticas do Membro Carmópolis. Para o óleo atingir as rochas carreadoras e migrar lateralmente até formar as acumulações, este passou inicialmente por um processo de migração vertical através da Falha de Atalaia (Figura 6.1).

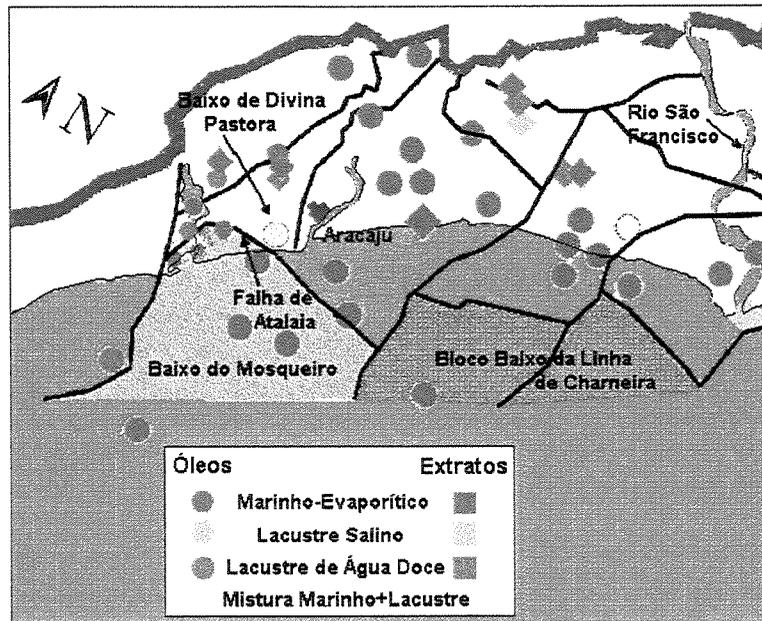


Figura 6.1: Mapa de ocorrência dos tipos de óleos e extratos orgânicos na Bacia de Sergipe. Em destaque a posição espacial do Baixo do Mosqueiro, onde estão localizadas as rochas geradoras do sistema Muribeca-Carmópolis, e das geradoras do bloco baixo da linha de charneira.

Segundo estudos geoquímicos elaborados por Hamsi Jr. (*op. cit.*), a base da seção Alagoas Superior, no Baixo do Mosqueiro, atingiu condições térmicas e de soterramento para a expulsão de óleo, a partir de aproximadamente 67 Ma, no Paleoceno, enquanto o topo deste intervalo só atingiu esta condição há 8 Ma, no Pleistoceno. Nas rochas localizadas em horizontes intermediários, a expulsão do óleo deve ter ocorrido entre estes valores. Hamsi Jr. (*op. cit.*) também concluiu que a expulsão mais intensa de petróleo ocorreu nos primeiros milhões de anos após o início deste processo e que as rochas geradoras posicionadas a profundidades mais rasas que 1700 m certamente estariam em uma condição imatura.

6.2 – O Simulador de Escoamento

O simulador de escoamento pode ser simplificada como um programa de computador que resolve numericamente a equação que descreve o fluxo de fluidos no meio poroso. Basicamente o programa faz o balanço ou conservação da massa em um sistema onde as condições iniciais e de contorno, além das características físicas do meio, são previamente

informadas. As incógnitas da equação diferencial resolvida pelo simulador são a pressão e as saturações.

Para modelar a migração secundária de hidrocarbonetos foi utilizado o simulador de escoamento *Imex™*, da *Computer Modeling Group (CMG)*, tanto na versão para estações de trabalho, como na versão para microcomputadores. O *Imex™* é um simulador do tipo *Black-Oil*, o qual considera 3 componentes (óleo, água e gás) e 3 fases, para um sistema isotérmico, sem reações químicas.

6.3 – Elaboração do Modelo Numérico

O modelo numérico consiste na discretização do meio físico contínuo de forma que sejam representadas todas as propriedades envolvidas no processo de fluxo no meio poroso, tanto no que refere-se a sua geometria e propriedades petrofísicas, como também às propriedades de rocha e fluido e condições iniciais. Nesta seção são apresentadas a metodologia utilizada na descrição do reservatório e na preparação das matrizes de condições iniciais, bem como as propriedades de rocha e fluido utilizadas na caracterização do meio.

6.3.1 – Descrição de reservatório

- Dimensão da malha de simulação

A primeira etapa na descrição de reservatório consiste na definição da dimensão da malha de simulação. Neste sentido, foram considerados uma série de aspectos onde destacam-se principalmente a geometria do reservatório e o número máximo de células disponíveis para elaboração da malha, que no caso foi de 10000. Considerando toda a área de ocorrência do Membro Carmópolis e uma área adicional para representar as rochas geradoras (banco de óleo), foi definida uma malha de 53x40, com células quadradas de 2000 m de lado. A malha foi orientada de forma que a direção principal do fluxo de óleo, entre o gerador e os reservatórios,

prevista pelo modelo de migração, fosse posicionada ortogonalmente à malha, procurando, também, proporcionar o menor número possível de células nulas por camada.

Com base no histograma de isólitas do Membro Carmópolis (Figura 6.2), admitiu-se uma espessura máxima de 180 m para esta unidade, que, por sua vez, foi subdividida em 4 camadas com, respectivamente, 30, 30, 60 e 60 m, do topo para base. A definição das camadas superiores com espessuras menores teve por objetivo uma melhor caracterização das porções do reservatório correspondentes às acumulações de petróleo.

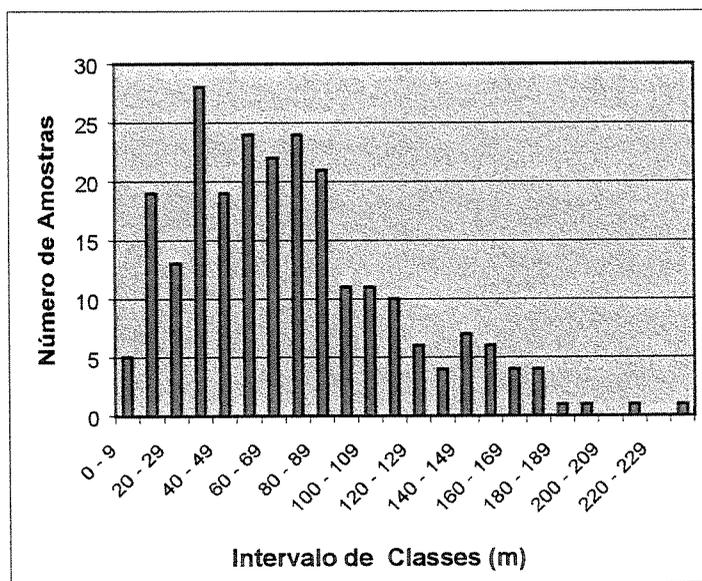


Figura 6.2: Histograma de isólitas do Membro Carmópolis obtido a partir de 242 poços exploratórios que atravessaram esta unidade.

- Tipo de malha adotada

O tipo de malha adotada para descrição do reservatório foi a *corner point*. Este tipo de malha permite que os cantos de cada célula da malha sejam perfeitamente amarrados com os cantos das células vizinhas, proporcionando um efeito visual mais semelhante a realidade. Para trabalhar com este tipo de malha é necessário informar ao simulador as coordenadas de cada canto, de cada célula. Para facilitar esta tarefa foi desenvolvido um programa que, a partir de um

arquivo contendo as coordenadas x , y e z , de cada célula da camada superior, e da informação da espessura de cada camada, gera automaticamente as matrizes de dados relativas a estas coordenadas.

Nas Figuras 6.3 e 6.4 estão ilustrados em planta, seção e em três dimensões, o topo da malha de simulação, na porção relativa a área de ocorrência do Membro Carmópolis. Nas regiões correspondentes aos altos internos do embasamento os valores de topo representam interpolações a partir das áreas contíguas.

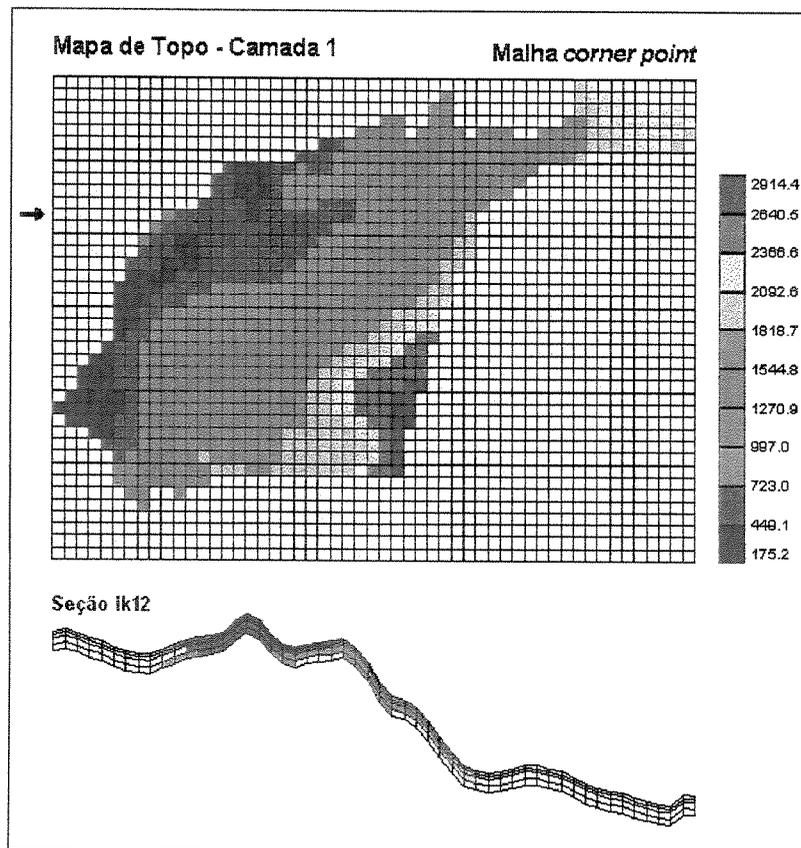


Figura 6.3: Mapa de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha *corner point*. Em detalhe a seção *ik12*.

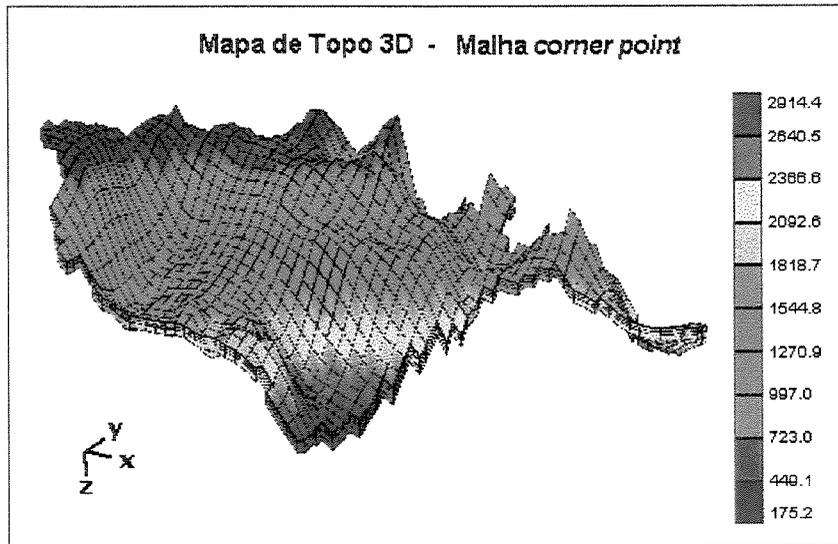


Figura 6.4: Mapa tridimensional de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha *corner point*.

- Caracterização do reservatório

Neste item, onde é apresentada a caracterização do reservatório propriamente dita, são comentados os critérios adotados para definição da geometria do reservatório e de suas propriedades permoporosas.

Para definição da geometria foram anuladas as células externas ao reservatório com base na área de ocorrência do Membro Carmópolis. A definição da geometria interna, assim como a variabilidade espacial da porosidade e permeabilidade, foi definida através de um comando do simulador de escoamento que representa a razão entre a espessura permoporosa efetiva (reservatório) e a espessura total da célula (*netgross*). Para cada célula da malha foi atribuído um valor situado entre zero e um, que funciona como um multiplicador da permeabilidade horizontal (*i* e *j*) e da porosidade. Quando o valor de *netgross* for igual a zero, a porosidade também assume um valor zero, o que corresponde a uma célula nula. A porosidade e a permeabilidade da malha foram definidas a parte, através de comandos específicos.

O cálculo da matriz de *netgross* foi realizado com base nos perfis de raios gama de aproximadamente 100 poços exploratórios distribuídos ao longo do Membro Carmópolis. Para

isto, inicialmente foi feita a separação visual das fácies reservatório e não reservatório presentes em cada poço, através da traçagem de uma linha base limítrofe entre estas fácies. Em seguida, os valores de raios gama, amostrados originalmente a cada 0,20 m, foram binarizados, 0 para não-reservatório e 1 para reservatório, e regularizados a cada 3 m. O valor de *netgross* para cada camada em cada poço foi então calculado dividindo-se a espessura de reservatório pela espessura total representada em cada camada. Quando uma determinada camada apresentava-se com menos da metade de sua espessura total representada, o valor de *netgross* foi considerado zero (Figura 6.5).

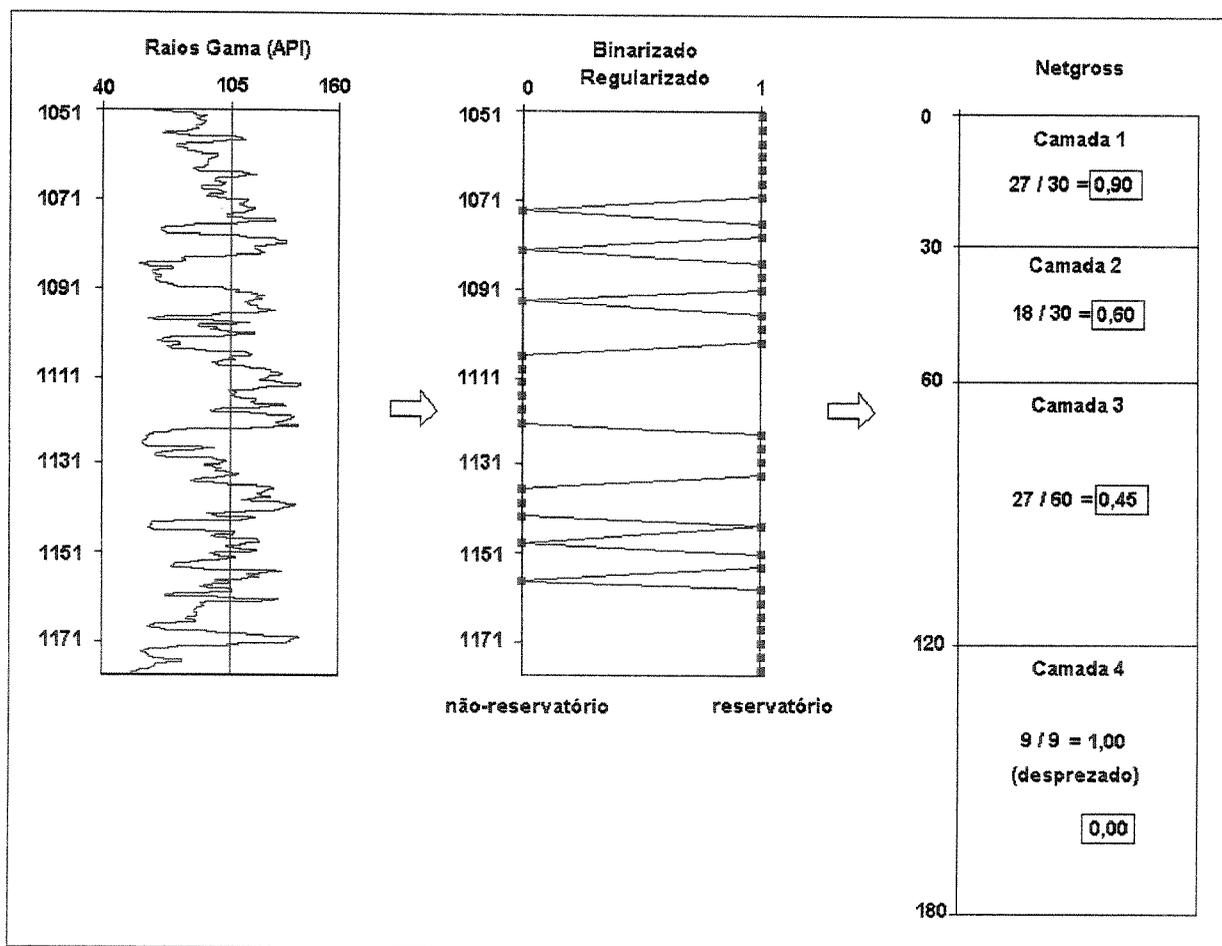


Figura 6.5: Desenho esquemático da metodologia adotada para o cálculo do valor de *netgross* para cada camada em cada poço.

Uma vez calculados os valores de *netgross* para cada camada em cada poço, estes foram estimados através da *krigagem* padrão do aplicativo *Surfer™* para todas as células de cada camada. Nas figuras 6.6 a 6.9, são apresentados os mapas de *netgross* obtidos, onde também é possível observar a área de ocorrência do reservatório.

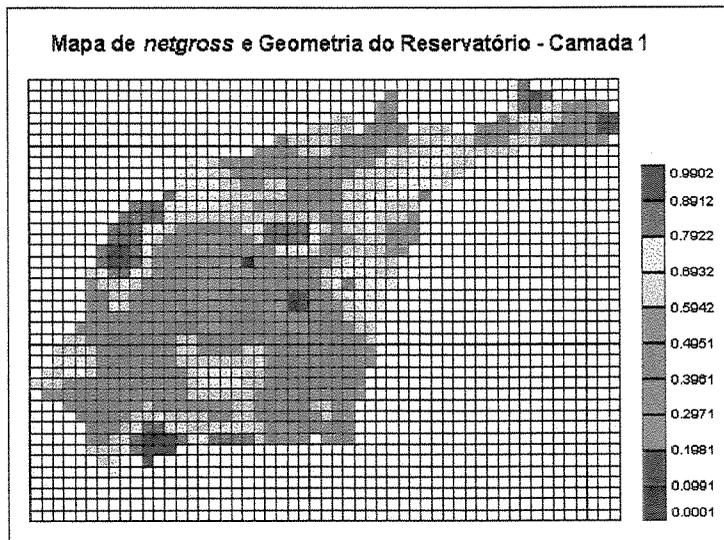


Figura 6.6: Mapa de *netgross* e área de ocorrência da camada 1.

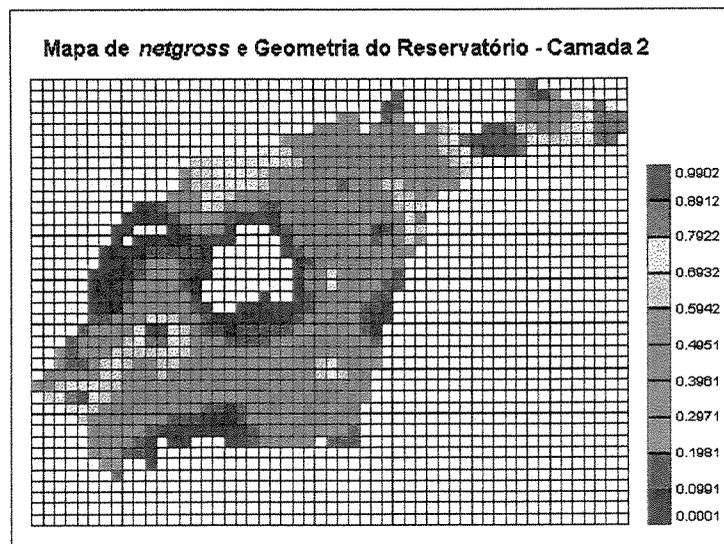


Figura 6.7: Mapa de *netgross* e área de ocorrência da camada 2.

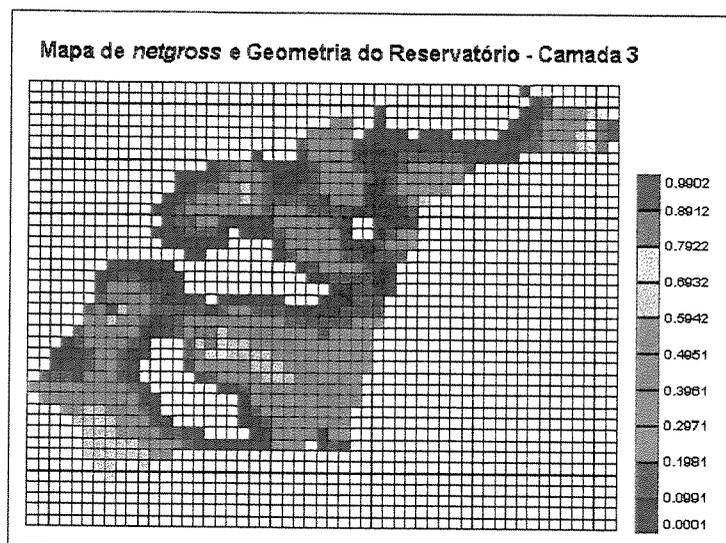


Figura 6.8: Mapa de *netgross* e área de ocorrência da camada 3.

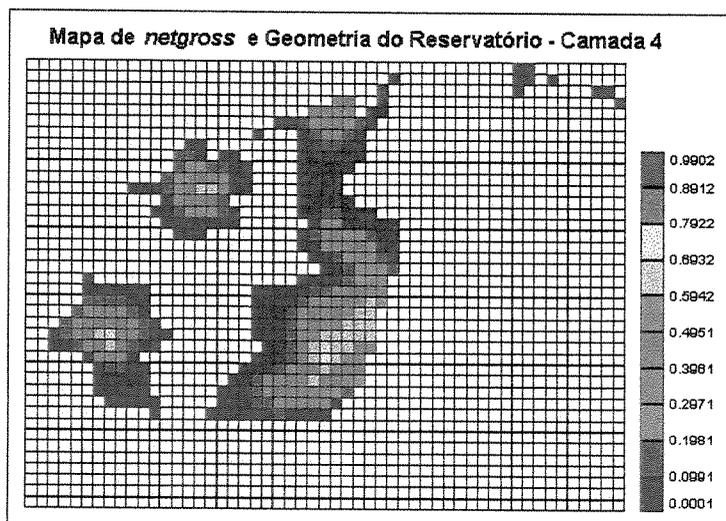


Figura 6.9: Mapa de *netgross* e área de ocorrência da camada 4.

Em relação a porosidade, permeabilidade horizontal e vertical, foram atribuídos valores de, respectivamente, 17 %, 200 mD e 60 mD, para todas as células. Salienta-se que estes valores são compatíveis com aqueles medidos nos campos de petróleo produtores no Membro Carmópolis.

- Banco de óleo e zona de falha

Na preparação do banco de óleo, as matrizes contendo as coordenadas x , y e z dos cantos das células, previamente elaboradas, foram alteradas e as células designadas para este fim ativadas, de forma que o banco fosse posicionado de acordo com a localização das rochas geradoras da seção Muribeca, no Baixo do Mosqueiro. Para determinação do volume de óleo presente no banco, foi tomado como valor de referência o volume de óleo *in situ* (*vois*) das acumulações que ocorrem no Membro Carmópolis. Inicialmente foi definido um volume aproximadamente 10 vezes superior ao *vois*. Após sucessivas simulações, esta relação foi sendo ajustada, mudando a porosidade do banco, até ser calibrado um volume adequado para o preenchimento das acumulações de óleo existentes nesta unidade estratigráfica. Desta forma, o banco definido apresenta 216 células de 2000 m de lado, distribuídas em 4 camadas de 30 m de espessura. Para cada célula foi atribuído uma porosidade de 34 % e *netgross* 1.

Para elaboração da zona de falha foram disponibilizadas 4 fileiras de células ($j34$ a $j37$), sendo a espessura das camadas calculada de forma que a diferença de nível entre o topo do reservatório ($j33$) e a base do banco ($j38$) fosse regularmente distribuída (Figura 6.10).

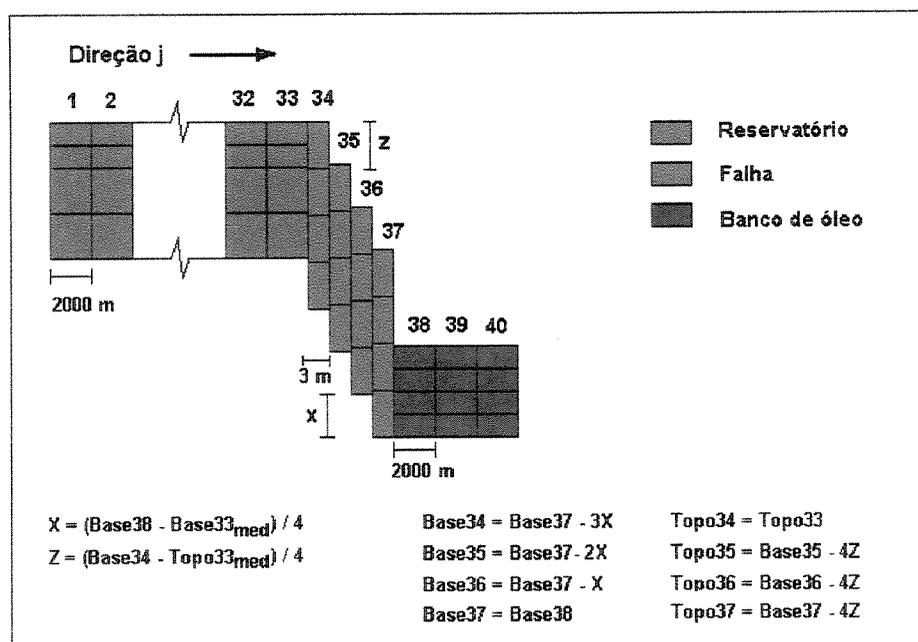


Figura 6.10: Desenho esquemático do método usado para elaborar a geometria da zona de falha.

A dimensão j das células que representam a falha foi determinada respeitando a relação entre a espessura e o rejeito de zonas de falha definida por Power e Tullis (1995). Desta forma, considerando um rejeito médio de 400 m para Falha de Atalaia, calculou-se uma espessura de aproximadamente 3 m (Figura 6.11).

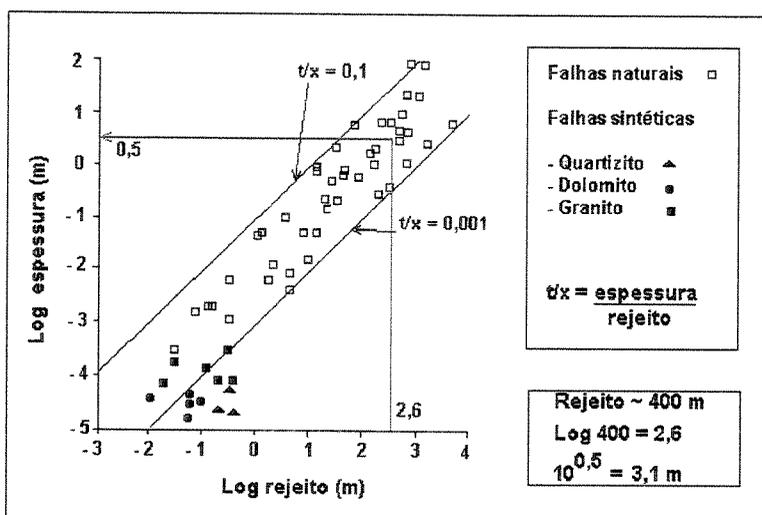


Figura 6.11: Relação espessura/rejeito de zonas de falha encontradas por Power e Tullis (1995).

Nas Figuras 6.12 a 6.14 é apresentado o posicionamento do banco de óleo e da falha, em planta e seções perpendiculares e paralelas à falha. A escala de cores refere-se o topo da malha.

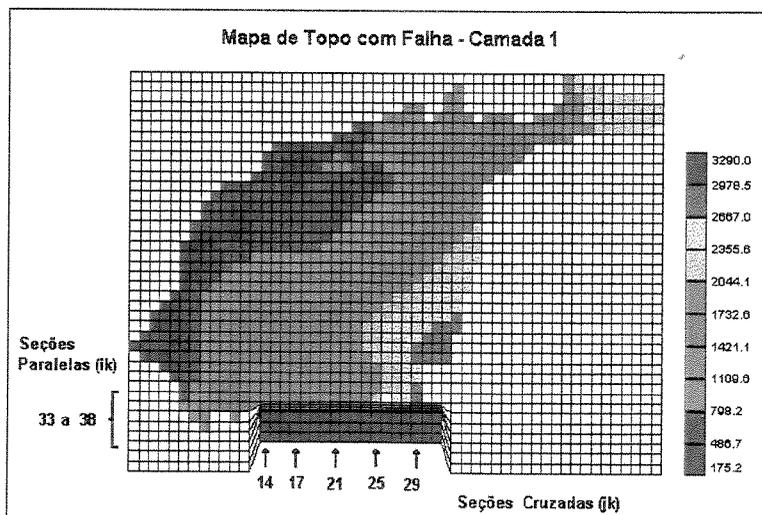


Figura 6.12: Mapa de topo com o posicionamento da falha e do banco de óleo.

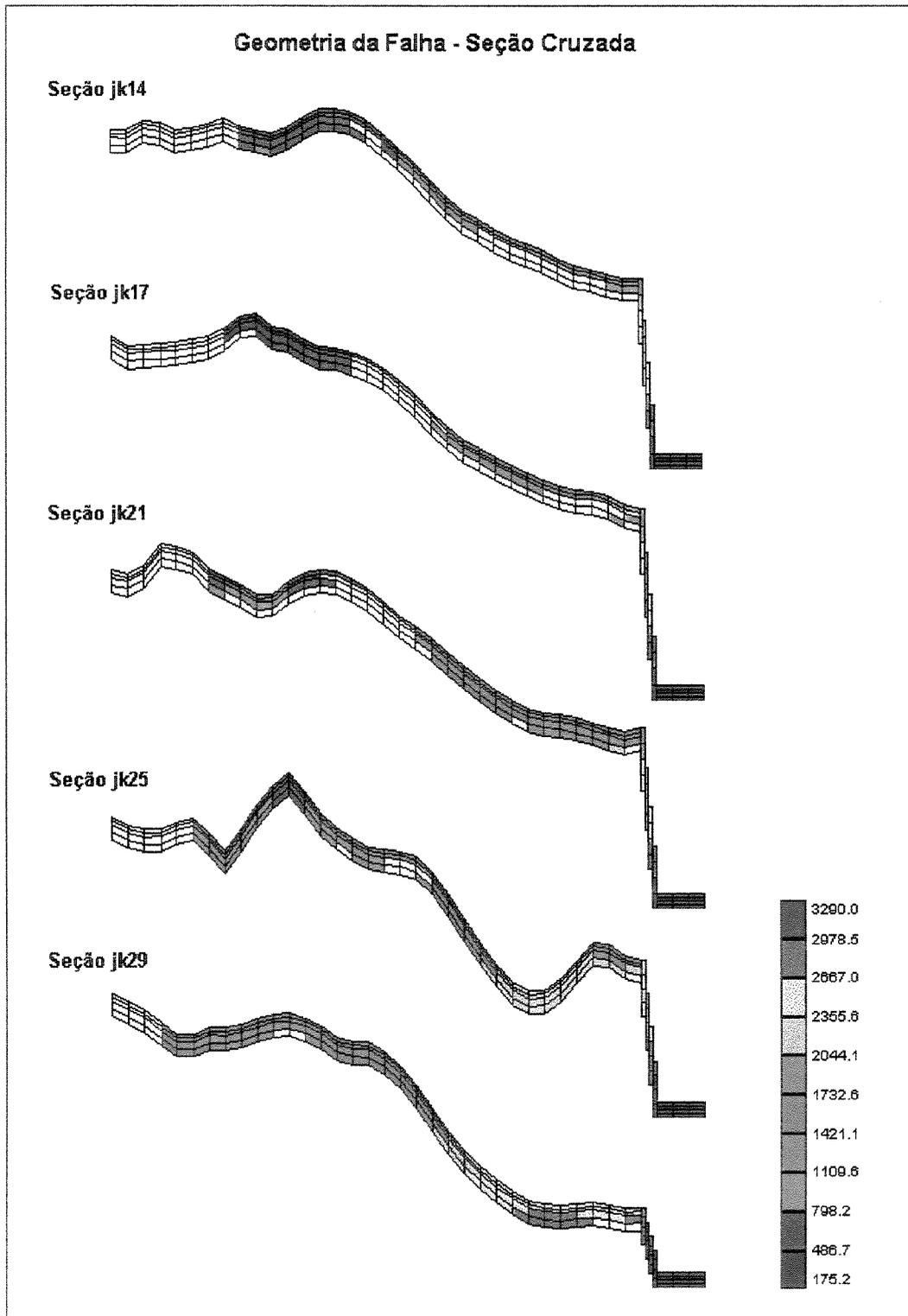


Figura 6.13: Seções perpendiculares a zona de falha. As células da falha apresentam um exagero de escala na direção j para permitir a visualização desta porção da malha.

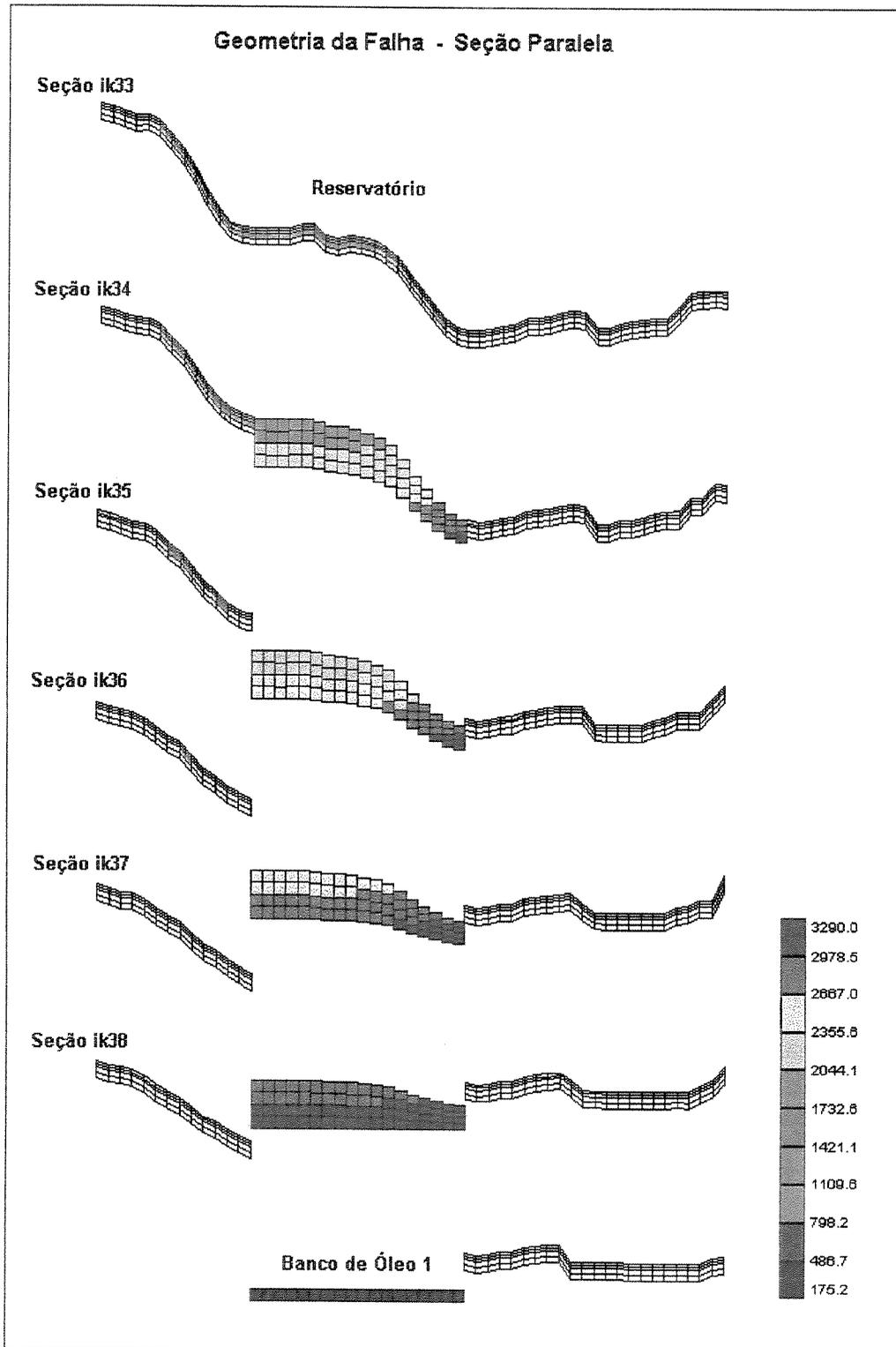


Figura 6.14: Seções paralelas a zona de falha, evidenciando detalhes desta feição e do reservatório e banco de óleo adjacentes.

Para a definição da permeabilidade das células na zona de falha foi utilizada a relação de anisotropia de permeabilidade definida por Antonellini e Aydin (1994). Estes autores, através de análises com mini-permeômetros em arenitos eólicos do *Arches National Park* (EUA), verificaram que a permeabilidade perpendicular a uma banda de deformação é de uma a quatro ordens de magnitude menor do que a da matriz, podendo a permeabilidade paralela ao plano ser muito elevada, se o estado de tensões permitir que a superfície seja mantida aberta (Figura 6.15). Com base nestas relações, foram arbitradas permeabilidades de 1000 mD na direção do plano da falha e de 10 mD na direção ortogonal a esta, nas células que representam esta feição.

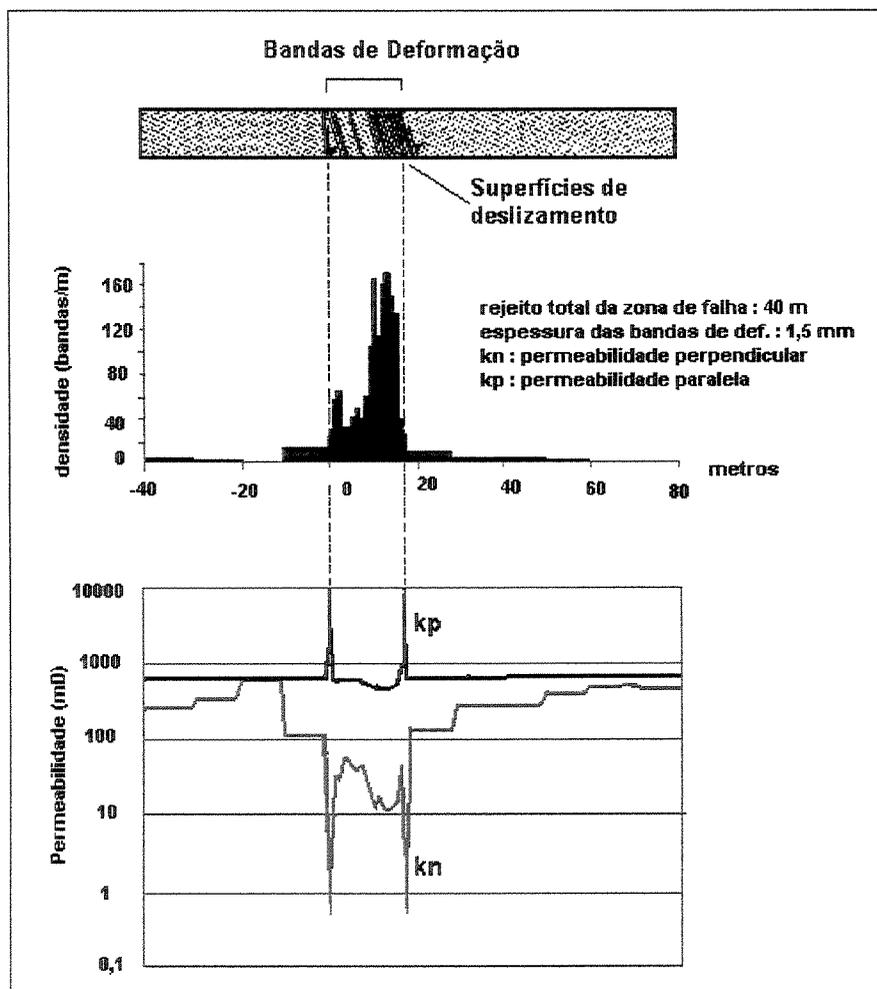


Figura 6.15: Anisotropia de permeabilidade em uma zona de bandas de deformação e planos de deslizamento (Antonellini e Aydin, 1994).

6.3.2 – Propriedades de rocha e fluido

As propriedades de rocha e fluido utilizadas no modelo de simulação foram adaptadas daquelas determinadas por Luvizotto *et al* (1996), para um estudo de comportamento da produção através de simuladores numéricos, em um campo produtor de petróleo no Membro Carmópolis. Desta forma, para determinação das propriedades do óleo foi utilizado o programa PVT (Luvizotto, 1993), que incorpora um conjunto de correlações de propriedades de fluidos, desenvolvidas com base em amostras de hidrocarbonetos provenientes da Bacia de Sergipe-Alagoas. Nos parâmetros de entrada do programa PVT, tanto a temperatura como a pressão máxima do reservatório foram definidas de acordo com a profundidade do sistema reservatório-gerador. Em relação à pressão de bolha, foi atribuído um valor de forma que não ocorresse a liberação de gás em nenhuma parte do sistema. Este procedimento teve por objetivo trabalhar com um sistema bifásico, uma vez que os campos de petróleo localizados nas porções mais rasas do Membro Carmópolis não possuem capa de gás.

Os dados de entrada do programa PVT e as propriedades do óleo utilizadas na simulação numéricas estão resumidos nas Tabelas 6.1 e 6.2, respectivamente.

Tabela 6.1: Dados de entrada do programa PVT.

Parâmetro	Unidade	Valor
P_b - Pressão de Bolha	Kgf/cm ²	15,0
R_{si} - Razão de Solubilidade Inicial	m ³ /m ³	6,9
ρ_g - Densidade do Gás Dissolvido	Ar = 1	1,0
μ_o - Viscosidade do Óleo Morto	cp	70,0
T - Temperatura Média do Sistema	°F	200,0
ρ_o - Densidade do Óleo	°API	21,4

Tabela 6.2: Propriedades do óleo utilizadas na simulação numérica.

P (kgf/cm ²)	R_s (m ³ /m ³)	μ_o (cp)	B_o (m ³ /m ³)
1,50	1,93	63,33	1,0915
3,00	2,61	60,93	1,0933
4,50	3,23	58,92	1,0950
6,00	3,80	57,15	1,0966
7,50	4,36	55,55	1,0980
9,00	4,89	54,08	1,0994
10,50	5,41	52,73	1,1008
12,00	5,92	51,47	1,1021
13,50	6,42	50,29	1,1034
15,00	6,91	49,18	1,1046
111,25	39,38	20,02	1,1865
207,50	74,27	12,22	1,2746
303,75	110,61	8,68	1,3663
400,00	147,98	6,69	1,4606

As propriedades da água utilizadas na simulação estão apresentadas na Tabela 6.3

Tabela 6.3: Propriedades da água utilizadas na simulação numérica.

Parâmetro	Unidade	Valor
ρ_w - Densidade	g/cm ³	1,00
C_w - Compressibilidade	cm ² /kgf	60 x 10 ⁻⁶
B_w - Fator Volume de Formação	m ³ /m ³	1,00
μ_w - Viscosidade	cp	0,81

Para as propriedades de rocha, além da porosidade e da permeabilidade já comentadas, foi especificado uma compressibilidade da formação de 60×10^{-6} cm²/kgf. Em relação às propriedades de rocha-fluido foram utilizadas as curvas de permeabilidade relativa do sistema óleo-água determinados por Silva e Palagi (1993) para o Membro Carmópolis, desprezando-se os efeitos capilares (Tabela 6.4, Figura 6.16).

Tabela 6.4: Dados de permeabilidade relativa do sistema óleo-água utilizados na simulação.

S_w	k_{rw}	k_{row}
0.200	0.0000	0.8620
0.210	0.0068	0.8031
0.230	0.0204	0.6853
0.250	0.0337	0.5710
0.270	0.0450	0.4785
0.300	0.0617	0.3519
0.350	0.0884	0.2345
0.400	0.1231	0.1522
0.450	0.1750	0.0991
0.500	0.2408	0.0581
0.550	0.3194	0.0291
0.600	0.4148	0.0111
0.650	0.5242	0.0023
0.672	0.5740	0.0000

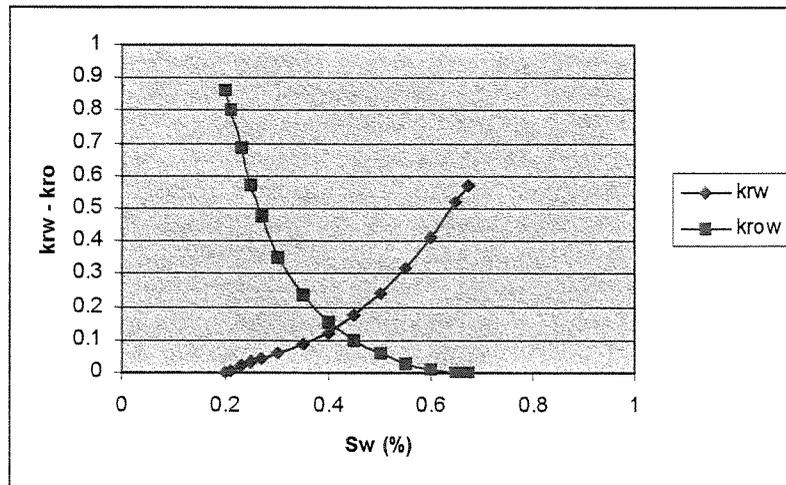


Figura 6.16: Gráfico de permeabilidade relativa do sistema óleo-água.

6.3.3 – Condições iniciais

As condições iniciais referem-se basicamente às pressões e saturações que cada célula da malha assumem no início da simulação. Estas condições podem ser informadas especificando-se a pressão, a uma profundidade de referência, e definindo a profundidade dos contatos entre os fluidos, ou informando diretamente o valor de condição inicial de cada célula através de matrizes de dados de pressão, saturação de óleo e saturação de água. No caso da modelagem da migração secundária de hidrocarbonetos, onde a condição inicial é uma situação de não equilíbrio, devido a presença do óleo em baixo da água, é necessário adotar o segundo procedimento. Desta forma, foi calculada a pressão de cada célula da malha considerando a sua profundidade e um gradiente de pressão de $0,1 \text{ kgf/cm}^2/\text{m}$. Em relação às saturações, foi definido um valor de Sw de 0,20 para o banco de óleo e de 1,00 para o reservatório, e de So de 0,80 para o banco e de 0,00 para o reservatório.

6.4 – Controle numérico

Na seção de controle numérico do modelo de simulação, basicamente foram ajustados o tamanho máximo do passo no tempo e o número máximo de passos. O tamanho máximo de passo no tempo foi calibrado, a partir de várias simulações, em 150 anos. Este valor permite um

máximo avanço no tempo para cada passo, sem provocar erro numérico na simulação. O número máximo de passos foi definido de forma a possibilitar que sejam considerados tempos de observação suficientes para o processo da migração secundária ser concluído e o sistema atingir uma condição de equilíbrio.

A formulação matemática definida para o cálculo numérico foi a adaptativa (*adaptive implicit method*).

6.5 – Resultados Obtidos

Nesta Seção são apresentadas uma série de imagens, em planta, modelos tridimensionais e seções cruzando as acumulações configuradas, mostrando a evolução da saturação de óleo ao longo do tempo (Figuras 6.17 a 6.27). Nos mapas, para efeito de comparação, também é apresentada a localização dos quatro principais campos de petróleo que produzem no Membro Carmópolis. As demais acumulações não são localizadas em função de seus tamanhos inexpressivos, diante da malha de simulação adotada (células de 4 km²).

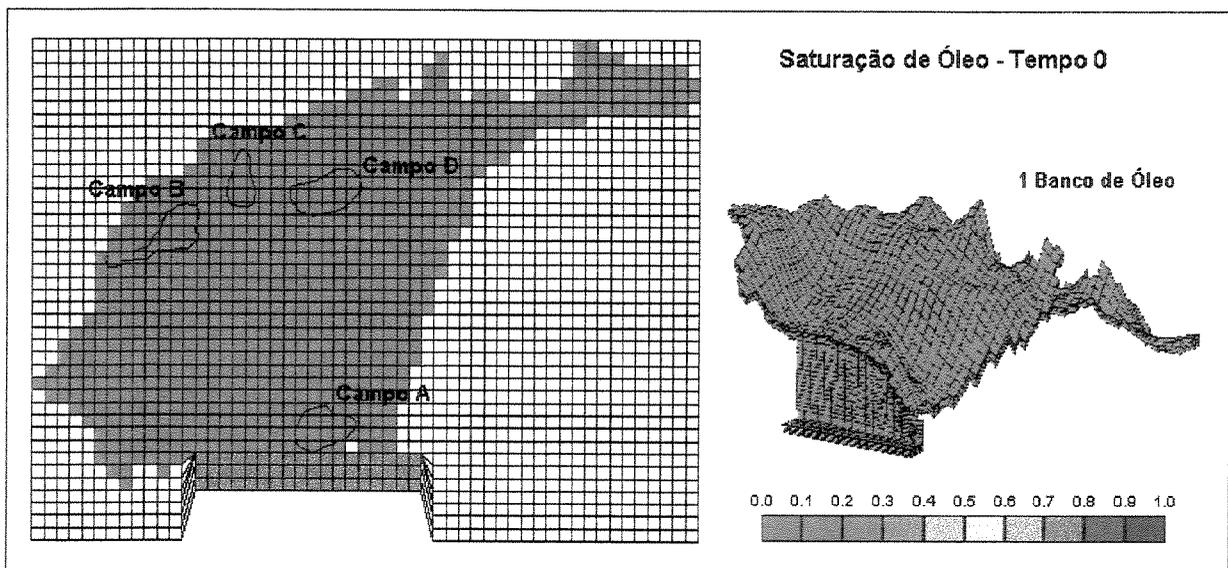


Figura 6.17: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo no tempo zero. Em laranja o banco de óleo, ao qual foi atribuída uma saturação inicial de 80 %.

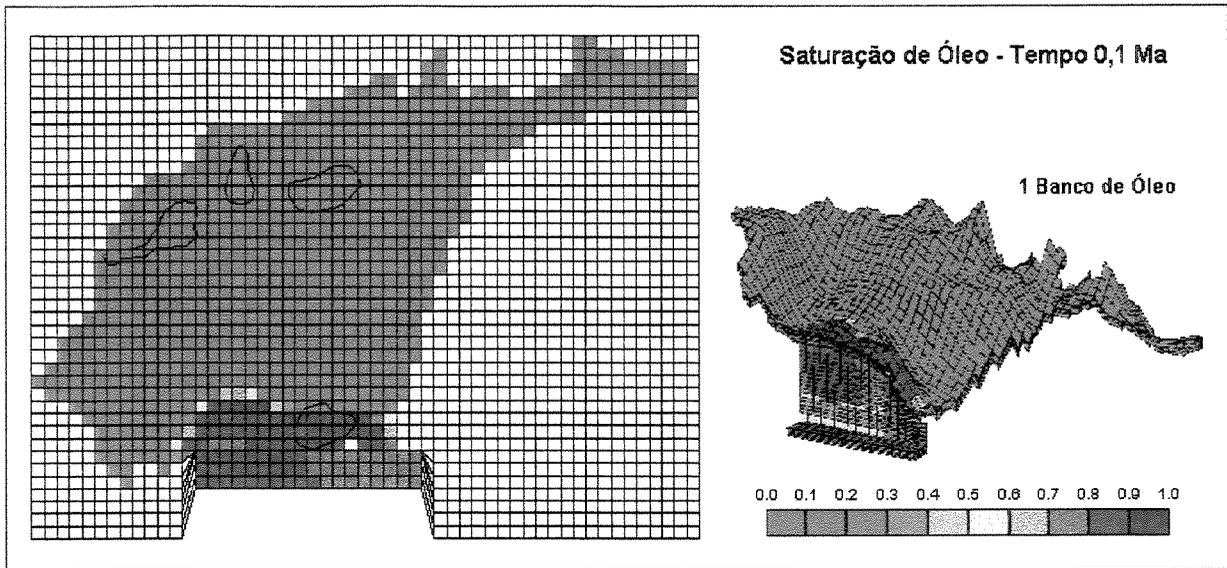


Figura 6.18: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,1 milhões de anos. A migração secundária inicia por deslocamento vertical do óleo através da zona de falha até atingir as rochas carreadoras. Após este período parte do óleo já alcançou o reservatório preenchendo o Campo A, embora esta acumulação ainda não apareça de forma individualizada.

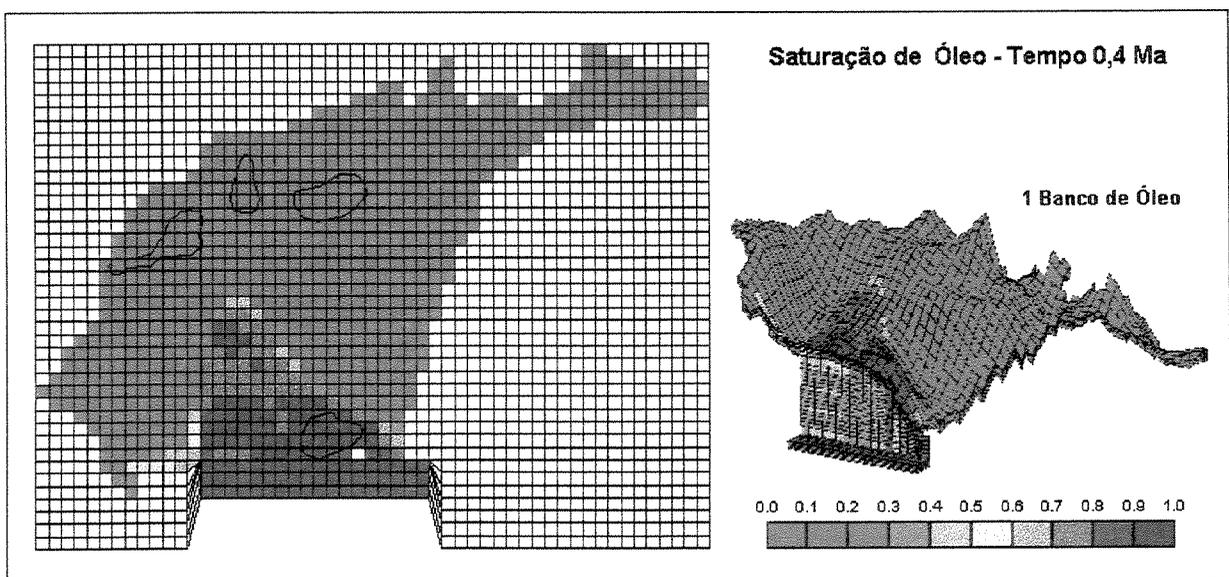


Figura 6.19: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,4 milhões de anos. Neste tempo é possível observar uma nítida focalização da migração, que é controlada principalmente pelo arcabouço estrutural do Membro Carmópolis.

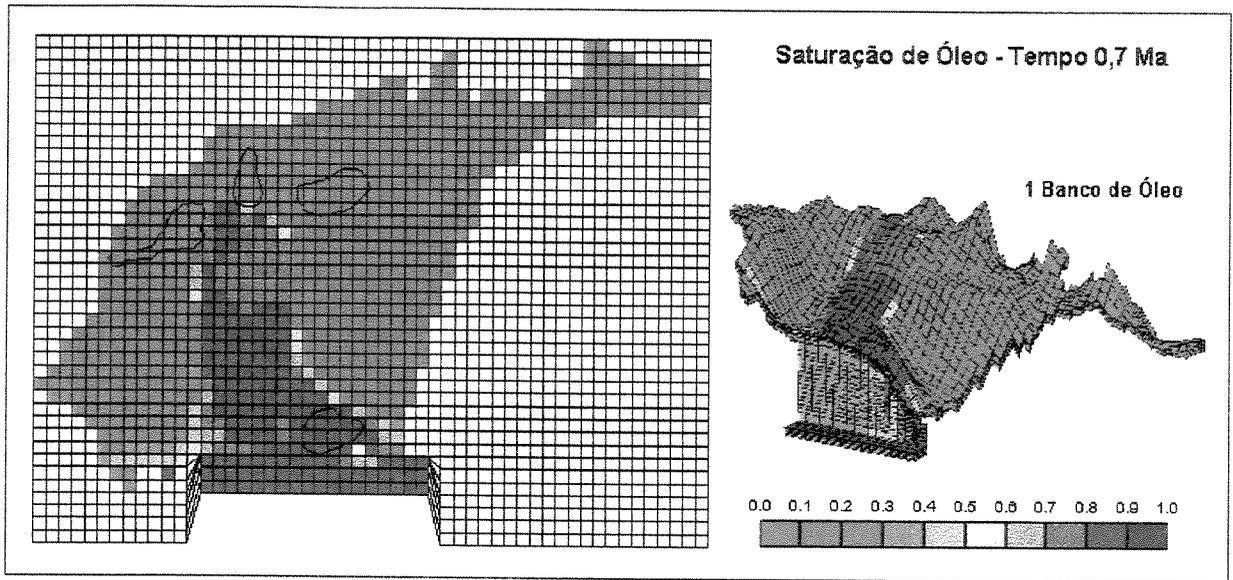


Figura 6.20: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,7 milhões de anos. Neste período a frente de migração já atravessou a área correspondente ao embasamento fraturado.

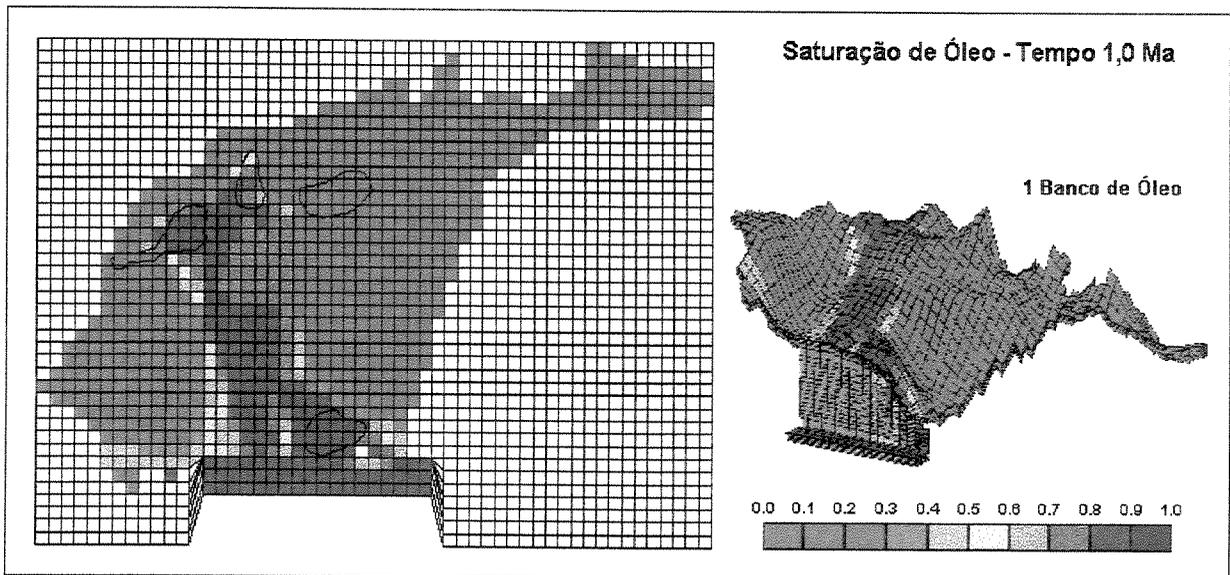


Figura 6.21: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorrido 1,0 milhão de anos. Nesta época começam a ser preenchidos os Campos B e C.

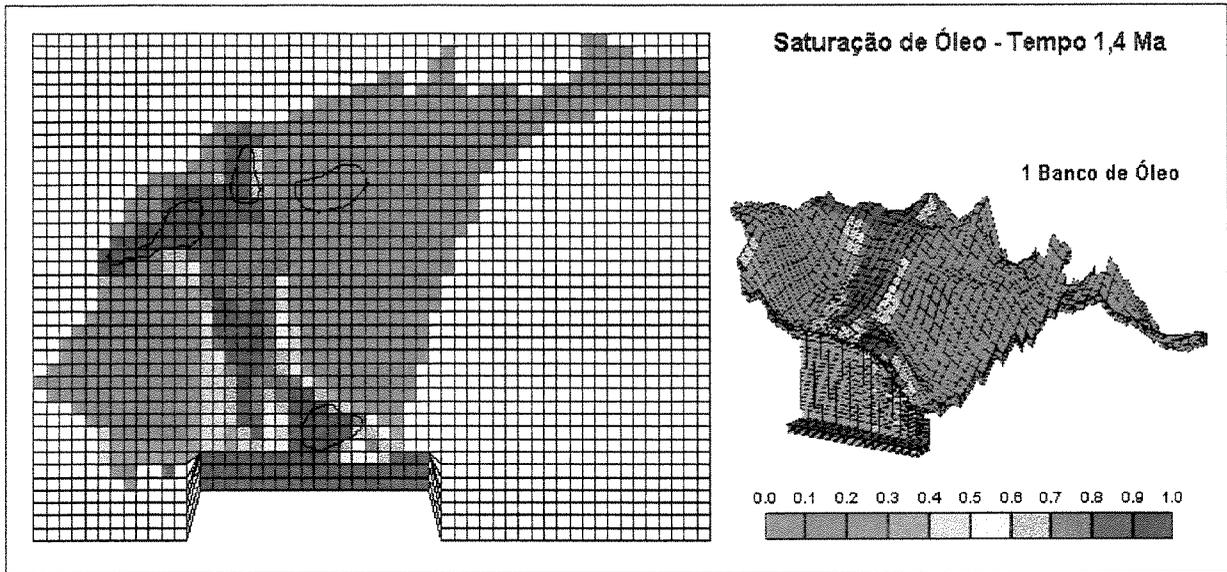


Figura 6.22: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,4 milhões de anos. Nesta época os Campos B e C já estão completamente preenchidos e o Campo A começa a aparecer individualizado.

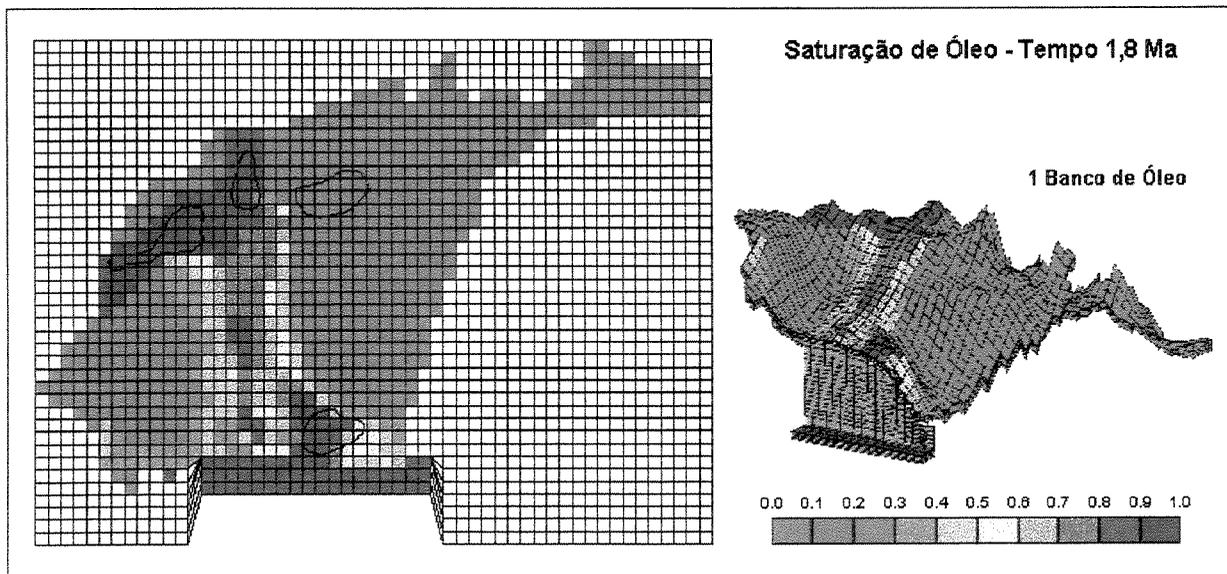


Figura 6.23: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,8 milhões de anos. Nesta época é possível observar as prováveis áreas de escape de óleo para superfície, a norte do Campo C e a oeste do Campo B. As elevadas saturações de óleo observadas na rota de migração indicam que o processo ainda não atingiu o equilíbrio.

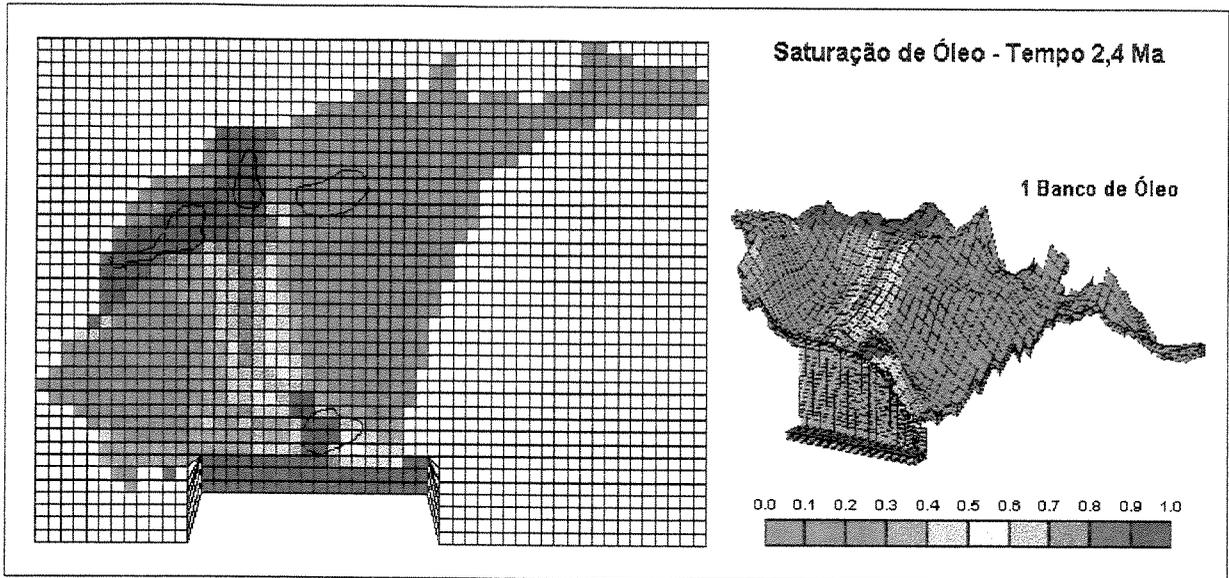


Figura 6.24: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 2,4 milhões de anos. O processo atingiu o equilíbrio, sem ser preenchido o principal campo de petróleo que produz no Membro Carmópolis.

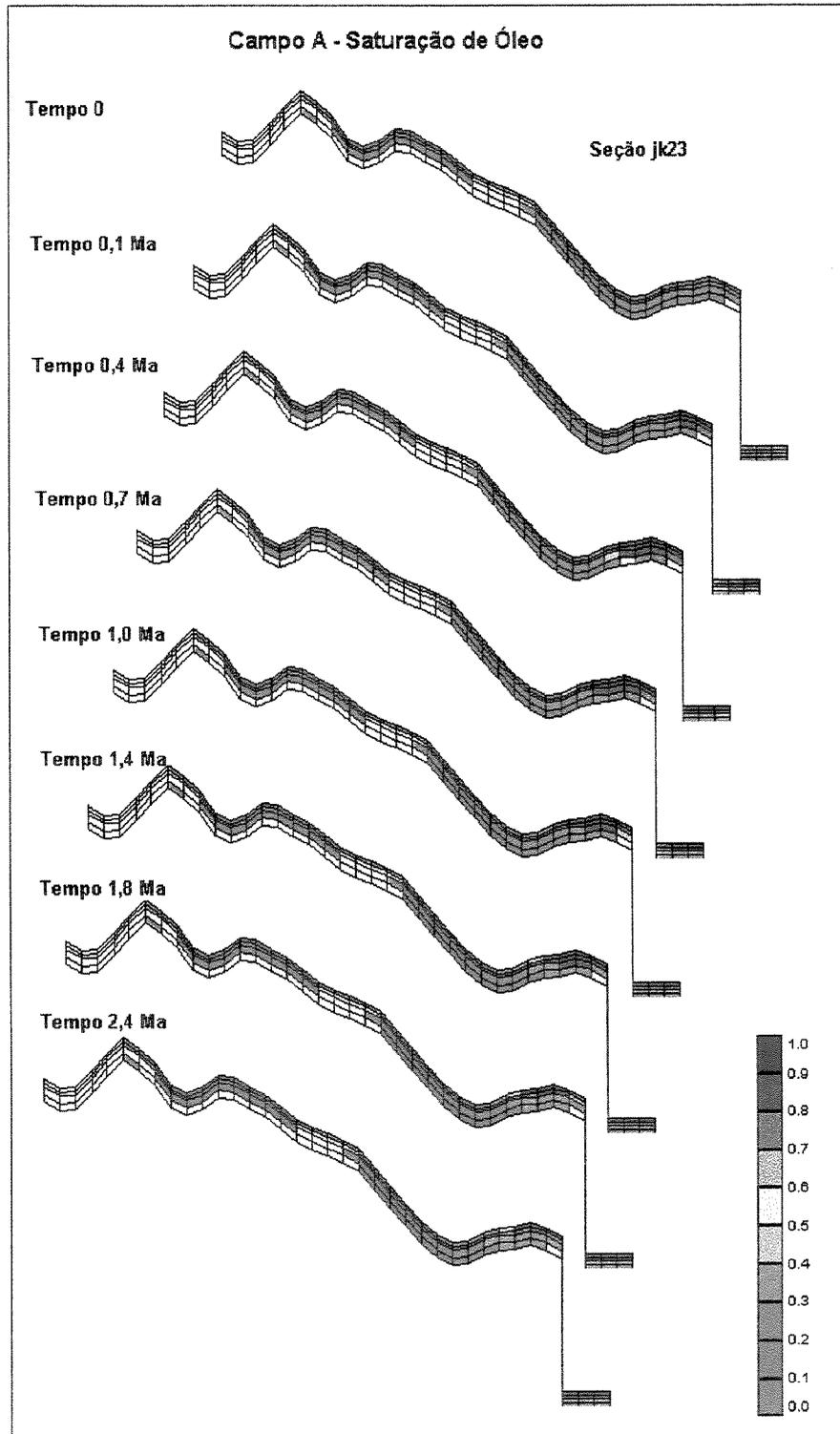


Figura 6.25: Seções evolutivas do preenchimento do Campo A. O maior número de células com saturações elevadas de óleo nos primeiros tempos devem-se ao maior do volume de óleo proveniente do banco no começo do processo.

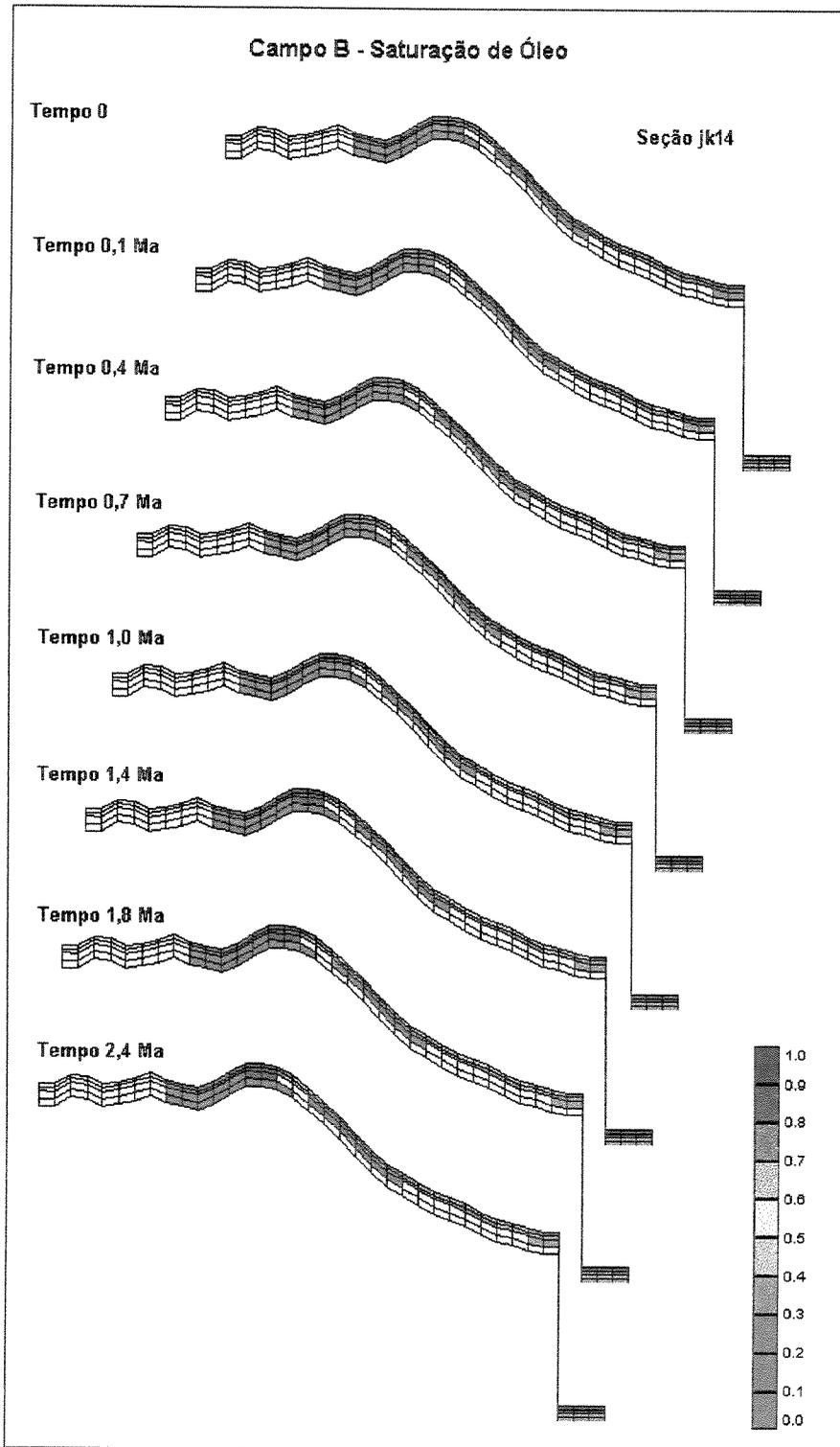


Figura 6.26: Seções evolutivas do preenchimento do Campo B. Conforme pode-se observar, a rota de migração ocorre praticamente em linha reta entre esta acumulação e o banco de óleo.

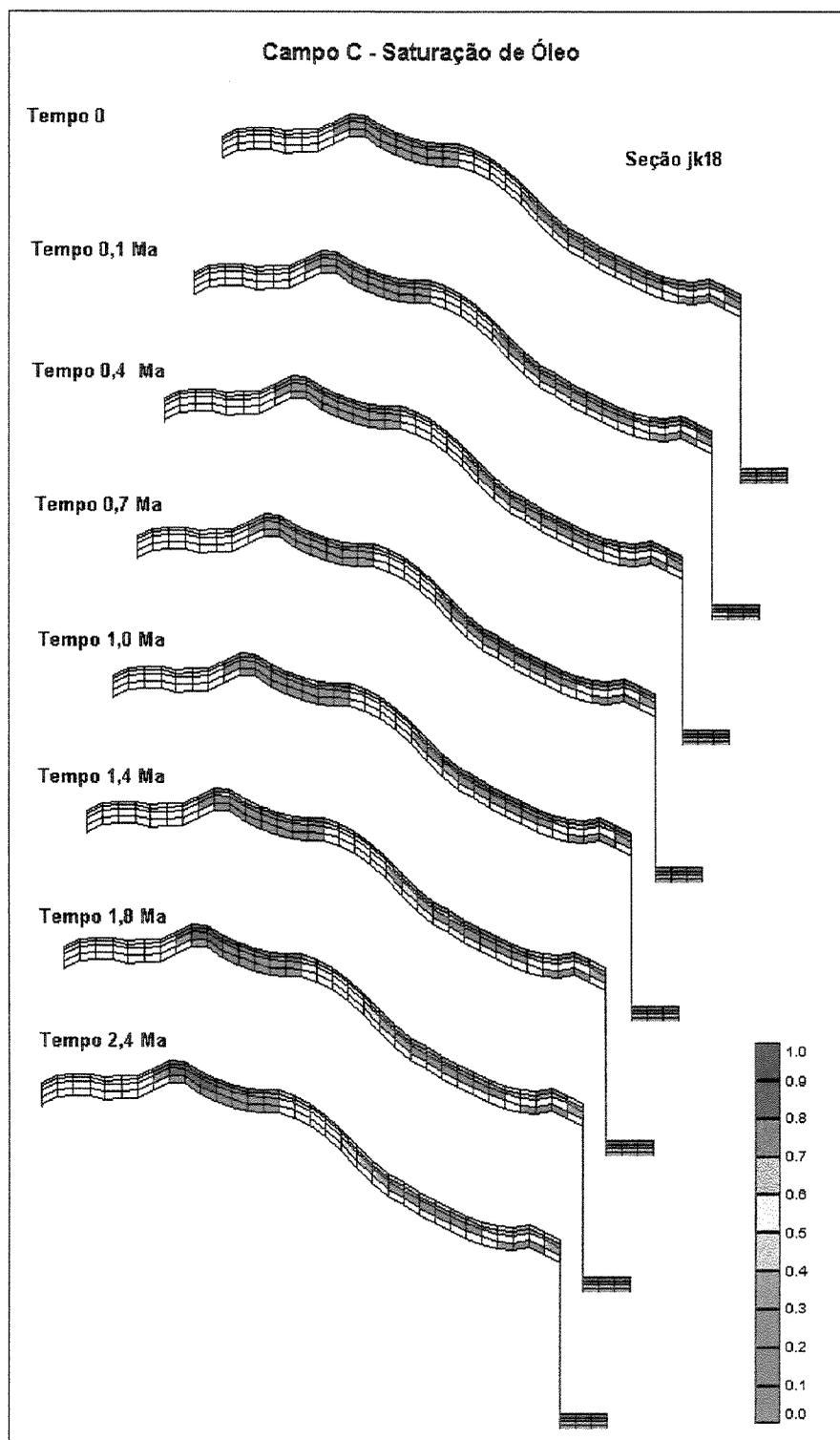


Figura 6.27: Seções evolutivas do preenchimento do Campo C. Neste caso também verifica-se um alinhamento da rota de migração entre a acumulação e o banco de óleo. A elevada saturação de óleo observada a partir de 1,8 Ma é causada pelo aprisionamento do óleo no final da malha, representando a zona de escape que ocorre a norte do Campo C.

6.6 – Análise dos Resultados

A modelagem numérica da migração secundária de hidrocarbonetos do sistema petrolífero Muribeca-Carmópolis revelou que o tempo necessário para os Campos B e C serem formados é da ordem de 1,4 Ma, enquanto que para o Campo A, que está situado bem mais próximo das rochas geradoras, este período é bem menor, da ordem de 0,1 Ma. O volume inicial de hidrocarbonetos presente no banco de óleo, para que as acumulações fossem configuradas, foi de aproximadamente 22 vezes o volume de óleo *in situ* do Membro Carmópolis. Esta relação indica que boa parte do óleo expulso do gerador é retido no caminho de migração, devido a alta saturação de óleo residual definida pela curva de permeabilidade relativa do sistema óleo-água ($S_{or} = 32,8 \%$). A este respeito é importante comentar que foi disponibilizado no banco um volume de óleo em excesso, de forma que as áreas de escape para superfície também fossem configuradas.

Para tentar explicar o não preenchimento do Campo D, que é a principal acumulação de óleo existente neste sistema, foram levantadas três hipóteses:

- Tectônica Terciária
- Falta de representatividade do modelo de reservatório
- Limites do sistema petrolífero

Em relação ao primeiro item, é importante comentar que a rota de migração é fortemente controlada pelo arcabouço estrutural do topo das rochas carreadoras. Admitindo-se que o arcabouço atual, que está representado no modelo de reservatório, é o mesmo da época da migração (67 Ma atrás), qualquer movimentação tectônica, que porventura tenha ocorrido durante o Terciário, dificultaria a reprodução deste processo. Quanto ao segundo ponto, refere-se especificamente à área do embasamento fraturado, que está na rota de migração do óleo. A este respeito, gerou-se um modelo alternativo, atribuindo uma anisotropia de permeabilidade a esta área ($k_i = 10$ mD e $k_j = 1000$ mD), com o objetivo de representar as fraturas e forçar a canalização do óleo para o Campo D. Contudo, os resultados da simulação mostraram-se

semelhantes aos apresentados. Finalmente, em relação ao terceiro item, levanta-se a hipótese do óleo do Campo D não ser proveniente da seção Muribeca do Baixo do Mosqueiro e sim das rochas geradoras localizadas no bloco baixo da linha de charneira (vide Figura 6.1). Esta hipótese também foi modelada e os resultados são apresentados a seguir.

6.7 – Modelo de Migração com Dois Bancos de Óleo

O modelo de migração com dois bancos de óleo é semelhante ao anterior, sendo apenas adicionado um segundo banco de hidrocarbonetos (banco 2), com o objetivo de testar a hipótese do Campo D ter sido preenchido pelo óleo gerado no bloco baixo da linha de charneira. A migração secundária neste caso, ocorreria inicialmente na vertical, através de uma zona de falha, e antes de atingir o Membro Carmópolis o óleo atravessaria um percurso adicional, provavelmente através da discordância pré-neoalagoas. Para simplificar a modelagem, este banco foi posicionado justaposto ao reservatório, embora sua posição real seja mais para leste.

Neste modelo, o volume de óleo do banco 1 (Baixo do Mosqueiro) foi redimensionado para metade do volume utilizado no modelo anterior. Para o banco 2 foram disponibilizadas 108 células de 2000 m de lado, distribuídas em 4 camadas de 30, 30, 60 e 60 m de espessura, com porosidade de 17 % e saturação de óleo inicial de 80 %, de forma que o volume total dos bancos corresponde a aproximadamente 19,4 vezes o *vois* existente no Membro Carmópolis.

Nas Figuras 6.28 a 6.36, são apresentadas os resultados obtidos através da simulação numérica para o modelo de migração secundária proposto.

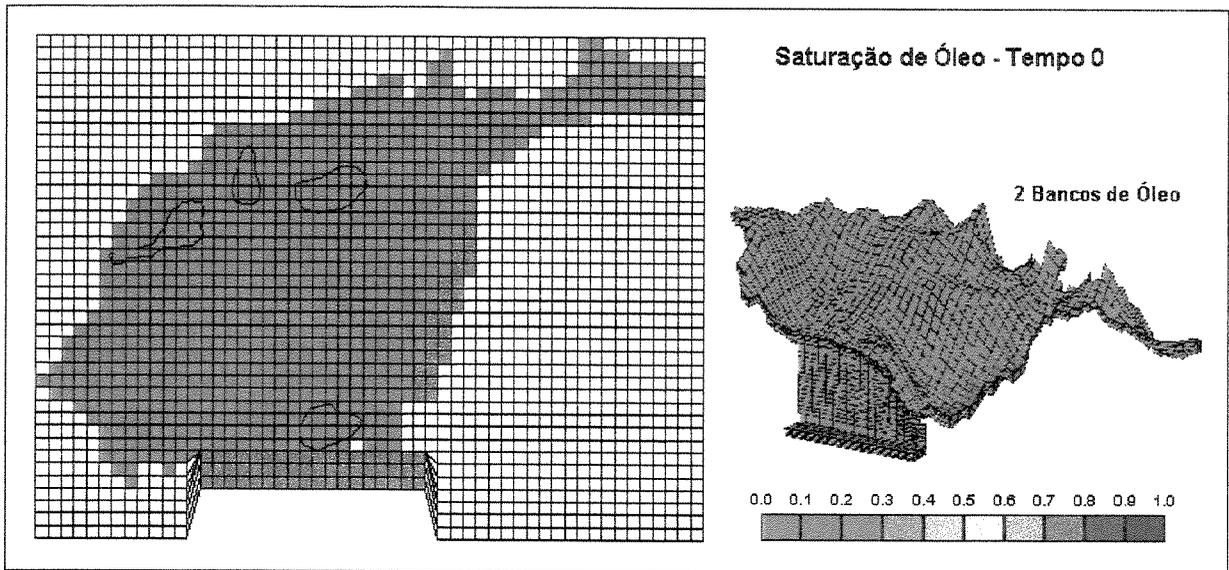


Figura 6.28: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo no tempo zero. Em laranja a localização espacial dos bancos de óleo.

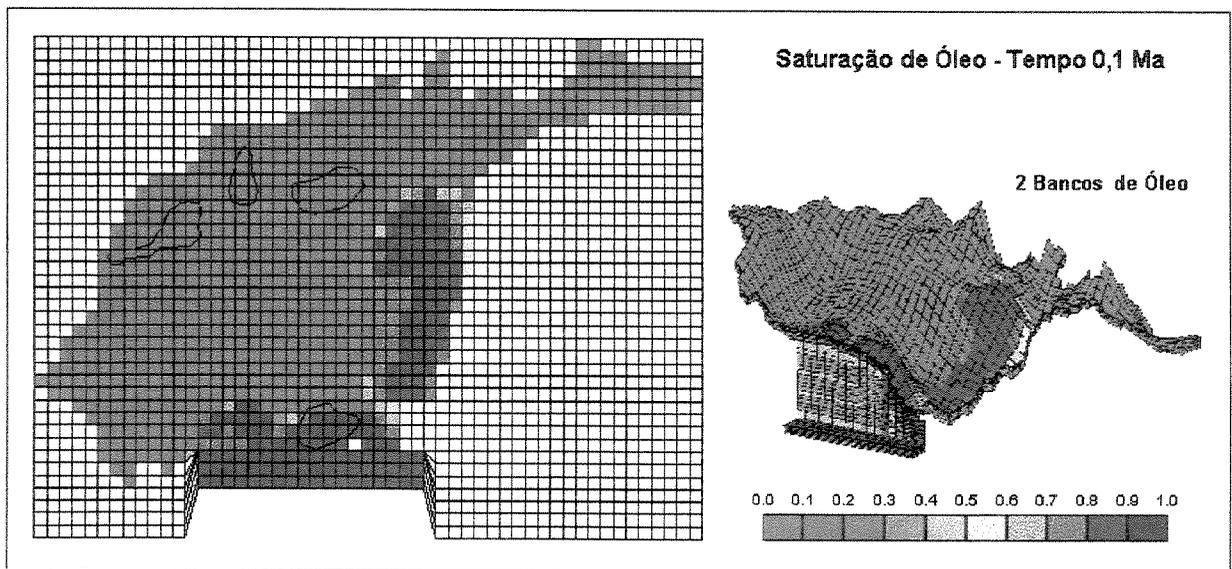


Figura 6.29: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,1 milhões de anos.

Após este período boa parte do óleo expulso do banco 1 já atravessou a zona de falha e atingiu o reservatório, preenchendo o Campo A. O óleo do banco 2, que originalmente foi disposto de forma inclinada, é focalizado na direção norte.

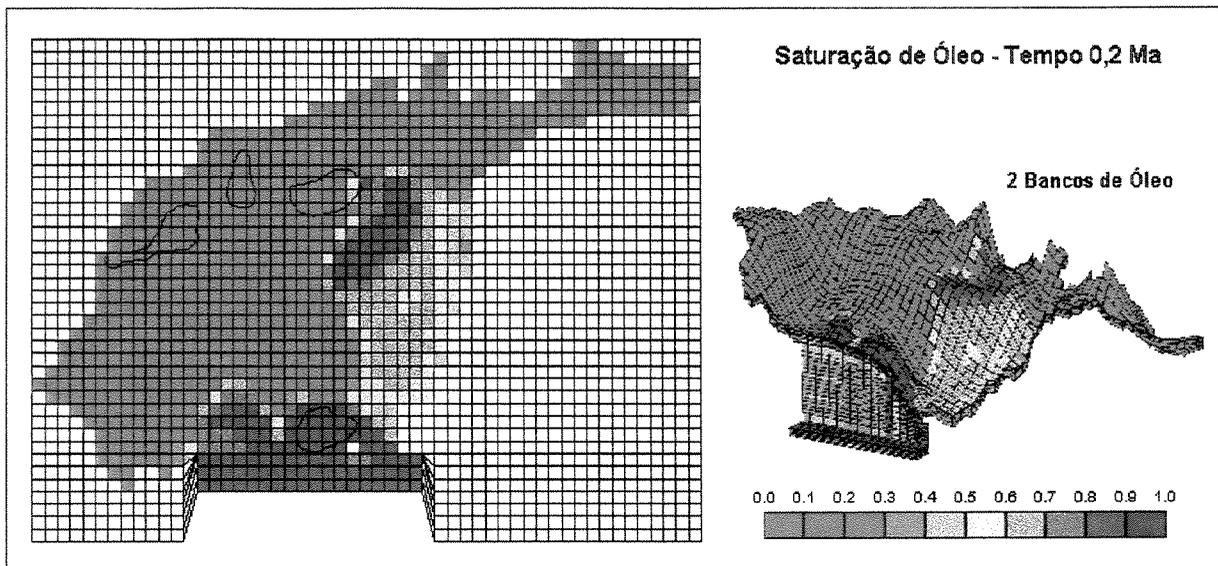


Figura 6.30: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,2 milhões de anos. Neste tempo o banco de óleo 2 já foi exaurido e a sua frente de migração avança em direção ao Campo D.

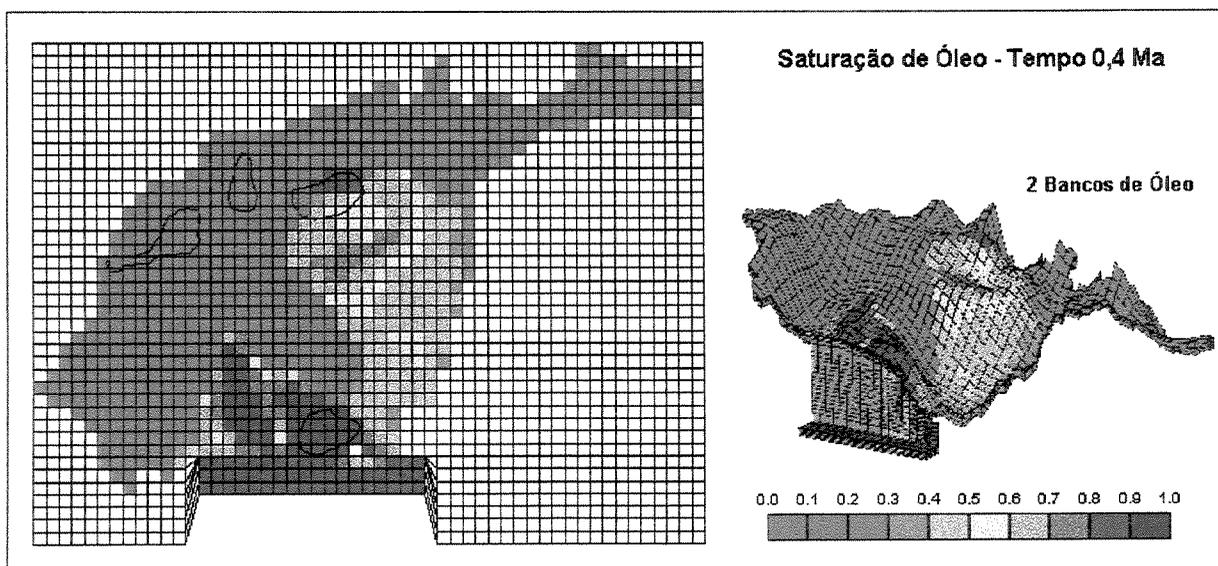


Figura 6.31: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,4 milhões de anos. Neste tempo o Campo D começa a ser preenchido. Na frente de migração proveniente do banco 1 é observado um pequeno atraso em relação ao modelo anterior, devido ao menor volume de óleo disponibilizado neste banco.

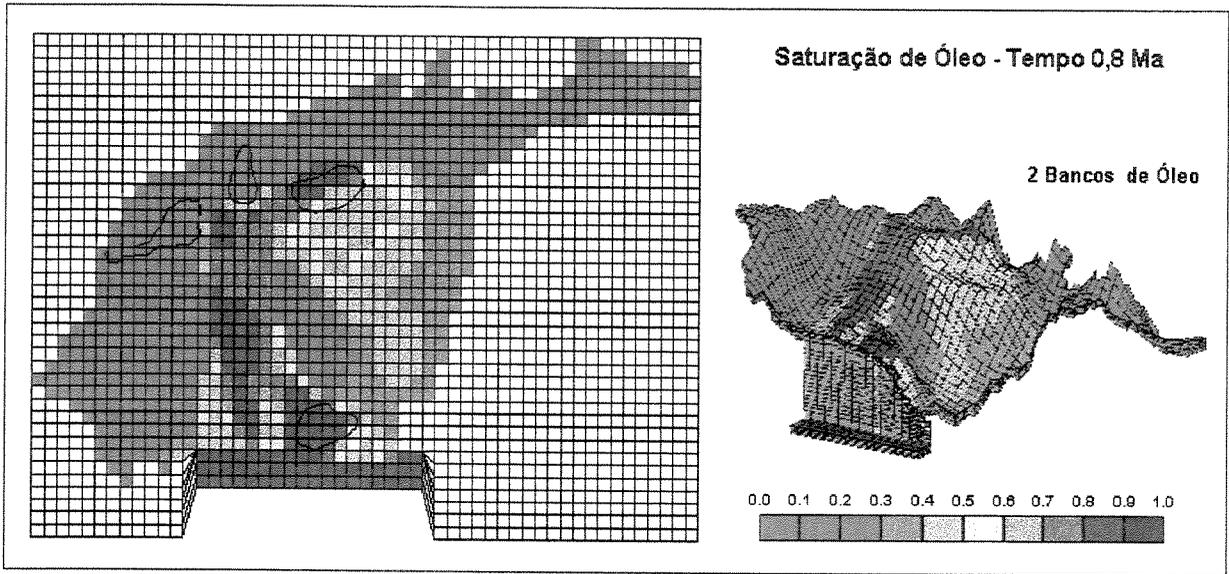


Figura 6.32: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 0,8 milhões de anos. Neste período o Campo D já está preenchido e as duas frentes de migração se encontram na altura da área do embasamento fraturado.

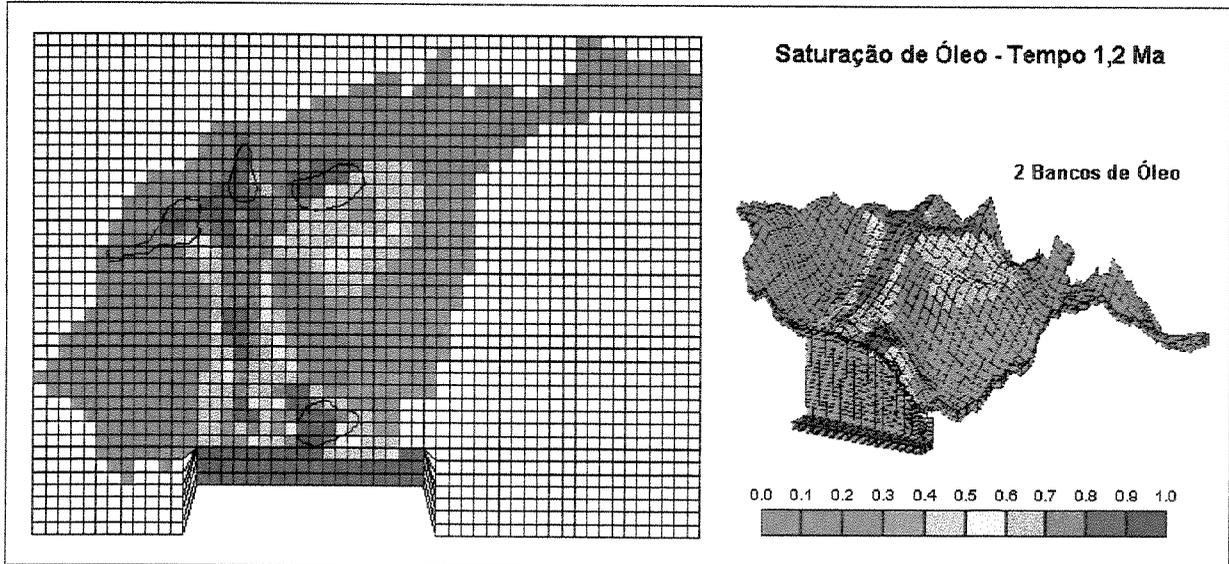


Figura 6.33: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,2 milhões de anos. Nesta época o Campo C já está formado e o Campo B começa a ser preenchido.

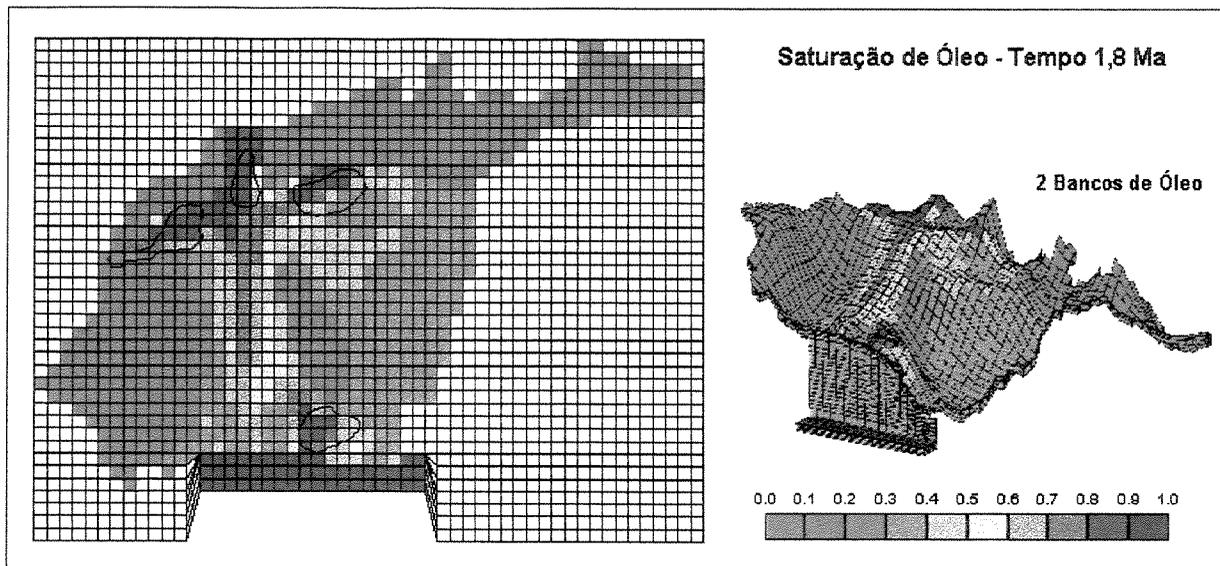


Figura 6.34: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 1,8 milhões de anos. Neste tempo verifica-se o escape de óleo para superfície na área norte do Campo C, enquanto continua o processo de preenchimento do Campo B.

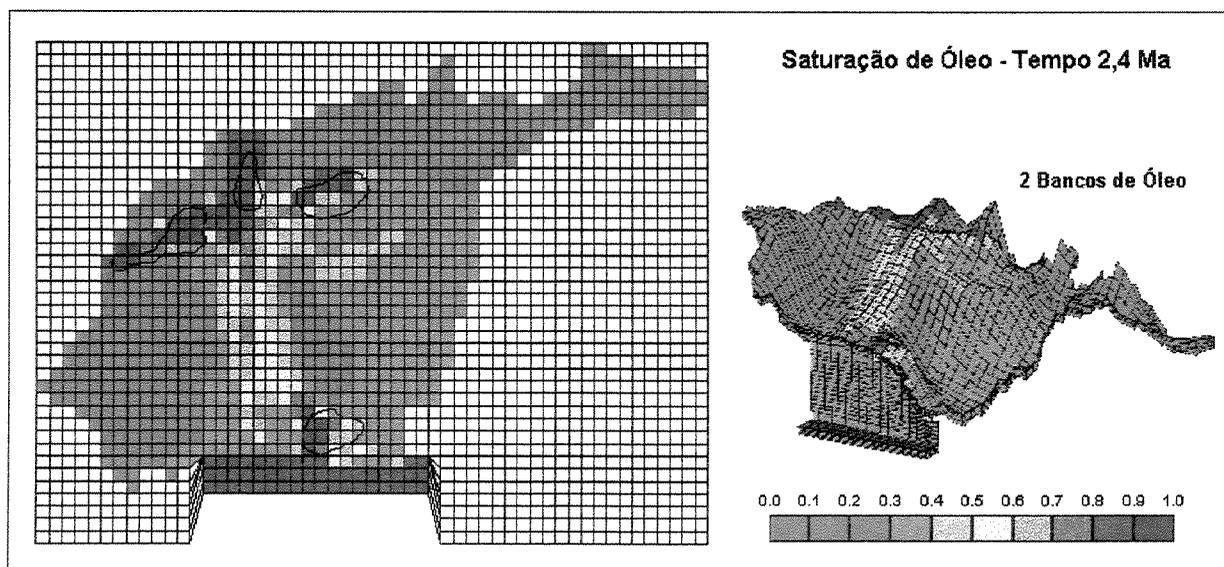


Figura 6.35: Mapa e modelo tridimensional da saturação de óleo após decorridos 2,4 milhões de anos. Após este período é atingida uma condição de equilíbrio, sendo preenchidas as quatro principais acumulações de hidrocarbonetos existentes no Membro Carmópolis e também configurada a área de escape de óleo para superfície a oeste do Campo B.

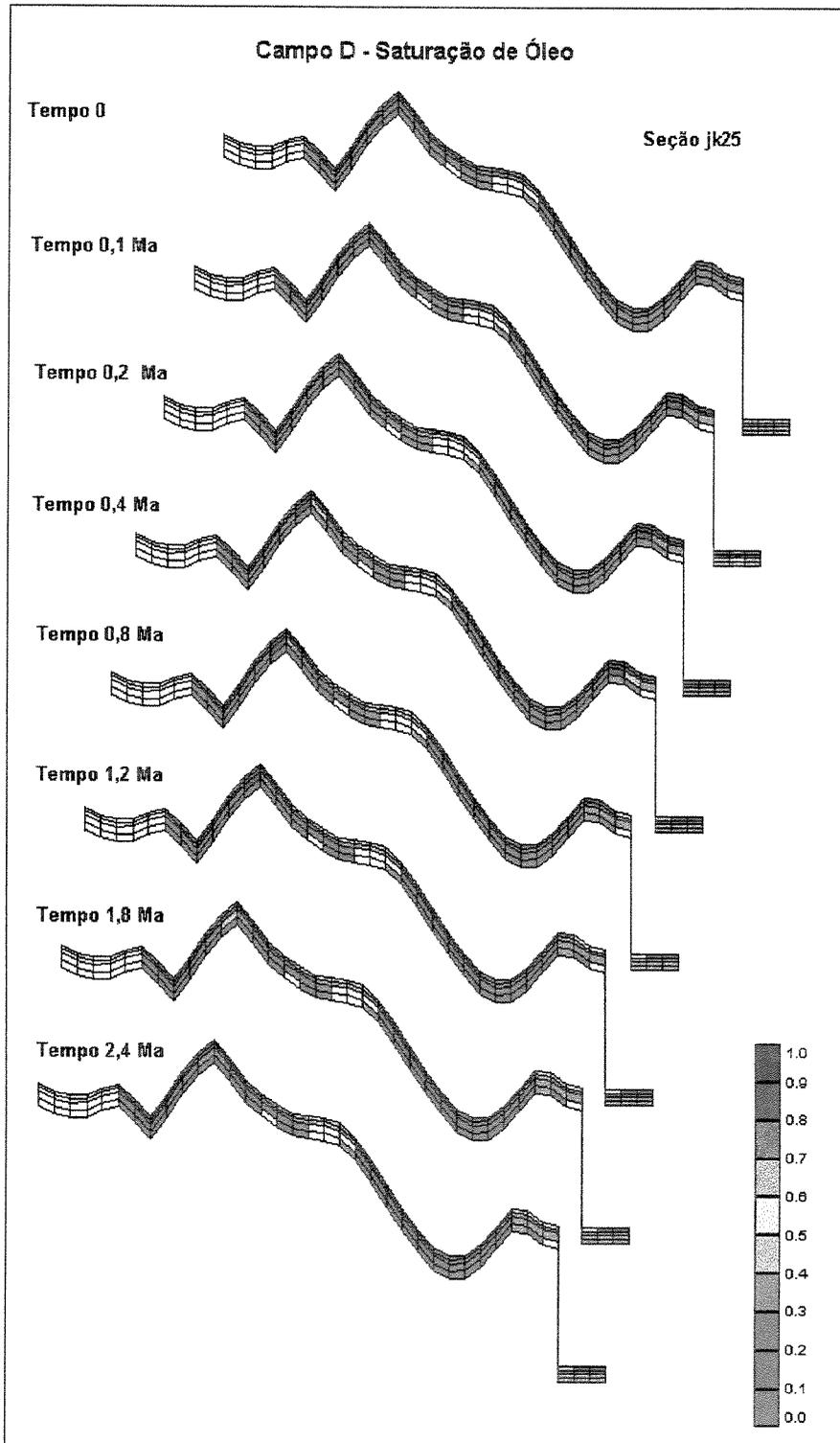


Figura 6.36: Seções evolutivas do preenchimento do Campo D. Observar que o óleo que preenche esta acumulação começa a aparecer no perfil a partir de 0,2 Ma, sendo proveniente do banco 2, que ocorre lateralmente a esta seção.

6.8 – Comentários Adicionais Sobre o Modelo Numérico

- Tipo de malha adotada

A opção por trabalhar com o tipo de malha *corner point* foi feita em função da melhor resolução visual que esta malha proporciona. Inicialmente, na descrição de reservatório, foi utilizada a malha variável, para a qual é necessário definir o topo de cada célula da camada superior. As imagens geradas com este tipo de malha apresentam um aspecto de desconexão das células devido a pequena discretização horizontal do reservatório (Figuras 6.37 e 6.38). Embora este efeito fosse apenas visual, sem comprometer o escoamento de fluidos, o modelo gerado com este tipo de malha foi abandonado.

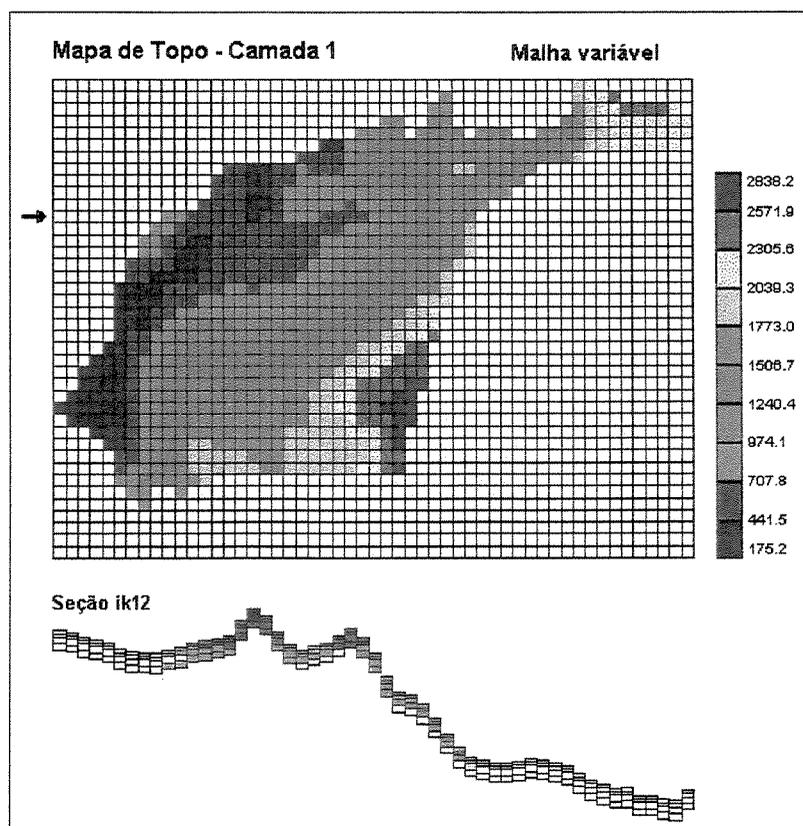


Figura 6.37: Mapa de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha variável. Em detalhe a seção *ik12*.

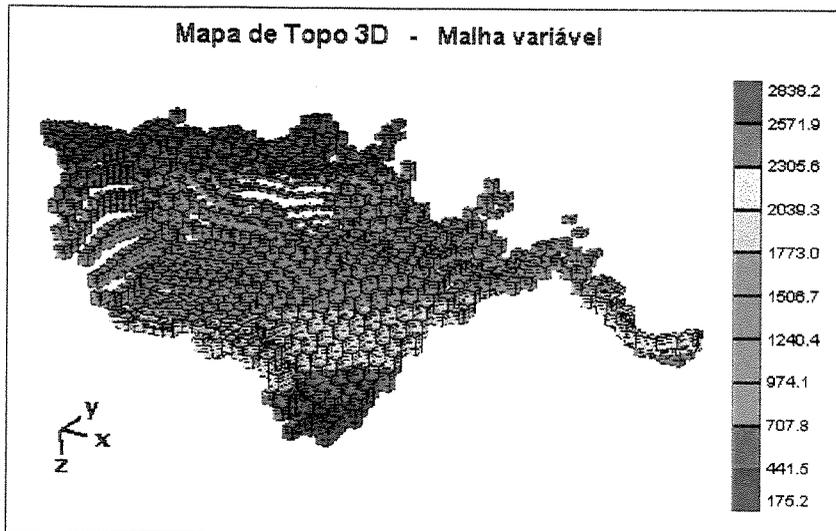


Figura 6.38: Mapa tridimensional de topo do Membro Carmópolis gerado a partir da malha variável.

- Descrição da zona de falha

A forma adotada para caracterizar a zona de falha, onde são definidas células com apenas 3 m de largura na direção j , faz com que as células desta porção apresentem um volume cerca de 650 vezes menor do que nas demais partes malha. Como a variação dos parâmetros de pressão e saturação no tempo é muito maior nas células menores, esta discrepância se reflete no controle numérico do modelo. Desta forma, para manter a estabilidade numérica na simulação, foi necessário definir um tamanho de passo no tempo muito menor do que seria necessário, caso todas as células apresentassem o mesmo tamanho. Em decorrência disto, o número total de passos no tempo é significativamente aumentado, refletindo diretamente no tempo de simulação.

Na Tabela 6.5 são apresentados os tempos de processamento das modelagens apresentadas e os respectivos equipamentos utilizados na simulação.

Tabela 6.5: Tempos de processamento de cada modelo e equipamentos utilizados.

Modelo	Equipamento	Tempo de Simulação
1 banco de óleo	* Estação de trabalho Sun – 167 MHz, 196 Mb	61,59 h
2 bancos de óleo	* Estação de trabalho Sun – 167 MHz, 128 Mb	68,41 h
1 banco de óleo	Microcomputador – Pentium II, 450 MHz, 128 Mb	20,45 h
2 bancos de óleo	Microcomputador – Pentium II, 266 MHz, 64 Mb	29,72 h

* operando compartilhado

Capítulo 7

Conclusões e Recomendações

7.1 - Conclusões

Neste trabalho foram modelados numericamente dois processos distintos e sobrepostos no tempo, que permitiram reconstituir a história evolutiva dos fluidos que preencheram os reservatórios do Membro Carmópolis, na Bacia de Sergipe, ao longo do tempo geológico. As principais conclusões do trabalho são:

- A modelagem numérica da salinização da água de formação reproduziu a salinidade atual, corroborando o modelo geológico-geoquímico de salinização que considera a infiltração de água meteórica em porções localizadas nas bordas da bacia, a dissolução de sal de uma unidade estratigráfica sobreposta e a difusão iônica lateral, os principais processos controladores da salinidade da água de formação.
- As diferenças observadas entre a imagem da salinidade medida e a imagem simulada podem ser causadas pelas imperfeições do modelo de salinização, deficiências do modelo numérico na representação das heterogeneidades, subjetividade no dimensionamento das fontes de sal e água doce e também pelas incertezas associadas ao mapa de isossalidade medido.

- De acordo com a modelagem numérica da salinização, o volume de sal dissolvido e incorporado à água de formação ao longo do tempo geológico foi da ordem de 1,85 km³.
- Tendo em vista que as dimensões laterais do sistema modelado são significativamente maiores que a vertical, a modelagem numérica da salinização da água de formação pode ser considerada um problema bidimensional.
- A modelagem numérica da migração secundária de hidrocarbonetos, considerando uma única fonte de óleo, reproduziu parcialmente as acumulações existentes no Membro Carmópolis, uma vez que o principal campo de petróleo que produz nesta unidade estratigráfica não foi preenchido.
- Para explicar o não preenchimento da principal acumulação de óleo da unidade estudada, através de modelagem numérica, foram consideradas três hipóteses: a) tectônica posterior ao processo de migração secundária, b) falta de representatividade (estrutural/petrofísica) do modelo de reservatório e c) subdimensionamento dos limites do sistema petrolífero.
- A terceira hipótese foi testada com sucesso, sugerindo que o óleo do campo não reproduzido pode ser proveniente de uma rocha geradora localizada em uma posição distinta da prevista pelo sistema petrolífero da bacia, o que também implica na existência de uma rota de migração diferente da conhecida.
- O tempo de migração secundária necessário para o óleo expulso do gerador atingir os campos de petróleo mais distantes foi da ordem de 1,0 Ma, o que significa uma velocidade de migração de aproximadamente 40 km/Ma, semelhante a que os continentes americano e africano vem se afastando (3-4 cm/ano).

- O tempo de migração deve ser tomado como uma aproximação da ordem de grandeza, dadas as simplificações do modelo numérico, tanto no que se refere a geometria do sistema e propriedades de rocha e fluido, como também na subjetividade do volume de óleo disponibilizado no banco.
- Os resultados obtidos através da modelagem numérica da migração secundária de hidrocarbonetos, onde são reproduzidos os principais campos de petróleo existentes no Membro Carmópolis, ratificam o simulador de escoamento como uma ferramenta auxiliar na exploração de petróleo.
- A modelagem numérica da salinização da água de formação evidencia que a variação da salinidade do reservatório, em um período compreendido entre o início e o término da formação de uma acumulação de óleo, é insignificante, uma vez que o processo de difusão iônica neste tempo (~ 1 Ma) é pouco expressivo. Desta forma, a salinidade da água irreduzível deve corresponder àquela existente no tempo da formação das acumulações de petróleo, considerando que o processo de difusão é desprezível após a chegada do óleo.
- Os processos modelados numericamente podem ser aplicados tanto em áreas onde existe um bom conhecimento geológico destes fenômenos, como em regiões sem modelos definidos. No primeiro caso, pode-se testar e aperfeiçoar os modelos existentes e, no segundo, analisar alternativas possíveis.

7.2 - Recomendações

- É recomendável que os processos modelados em escala de bacia sejam também realizados em escala de campo de petróleo. Este procedimento pode ajudar a compreender melhor o processo de preenchimento de cada acumulação e inferir a respeito da salinidade da água irreduzível.

- É apropriado que o modelo de migração secundária, onde é admitida uma segunda rota de migração, seja adequado de forma a representar a posição verdadeira das rochas geradoras. Desta forma, é possível uma melhor definição cronológica dos eventos que proporcionaram as acumulações.
- É interessante uma reavaliação geoquímica do sistema petrolífero proposto, com o objetivo de analisar a viabilidade da rota alternativa de migração e verificar a possibilidade das acumulações B e C serem constituídas pela mistura de óleos de diferentes fontes.

Referências Bibliográficas

- Abramowitz, M., Stegun, I. A. *Handbook of mathematical functions*. New York: Dover Publications, 1970, 1046 p.
- Anderson, D. E., Graf, D. L. Ionic diffusion in naturally-occurring aqueous solutions: use of activity coefficients in transition-state models. *Geochimica et Cosmochimica Acta.*, v. 42, p. 251-262, 1978.
- Antonellini, M., Aydin, A. Effect of faulting on fluid flow in porous sandstone: petrophysical properties. *AAPG Bulletin*, v. 78, n.3, p. 355-377, march 1994.
- Antonellini, M., Aydin, A. Effect of faulting on fluid flow in porous sandstone: geometry and spatial distribution. *AAPG Bulletin*, v. 79, n.5, p. 642-671, may 1995.
- Araújo, L.M. *Origem e evolução geoquímica das águas subterrâneas e regimes de fluxo das bacias sedimentares*. Relatório interno Petrobras. 1993.
- Berner, R. A. *Early diagenesis – A theoretical approach*. Princeton: Princeton University Press, 1980. p. 31-42.

- Borba, Cláudio. *Heterogeneidades estruturais em reservatórios: geometria e distribuição de falhas*. Campinas: Instituto de Geociências, Universidade Estadual de Campinas, 1996. 125 p. Dissertação (mestrado).
- Carslaw, H. S., Jaeger, J. C. *Conduction of heat in solids*. 2^a ed. Oxford: Clarendon press, 1959, 510 p.
- Coleman M. L. Water composition variations within one formation. In: Kharaka, Y.K. e Maest, A.S. *Water rock interection 6*. Balkema, Rotterda, 1992.
- Collins, A.G. *Geochemistry of oilfield waters*. New York: Elsevier Scientific Publishing Co., 1975, 496 p.
- Computer Modelling Group (CMG). *Imex advanced oil/gas reservoir simulator – User’s guide*. version 98. Calgary. 1998.
- Connan, J. Biodegradation of crude oils in reservoirs. *Advances in petroleum geochemistry*, v. 1, p. 299-335, 1984.
- Cunha, C. *Métodos numéricos para as engenharias e ciências aplicadas*. Campinas: Editora da Unicamp, 1993. Cap. 7: Soluções aproximadas para equações diferenciais ordinárias, p. 185-199.
- Custodio, E., Llamas, M. R. *Hidrología subterránea*. 1^a ed. Barcelona: Ediciones Omega, 1976. Cap. 12.1 Desplazamiento de fluidos miscibles en medios porosos y dispersión hidrodinámica, p. 1167-1195.
- Davies, G.R. Dolomite reservoir rocks: processes, controls, porosity development. *AAPG Short Course on Carbonate Porosity*. April 1979.

- De Gasperi, A. *Reavaliação geotérmica da Bacia Sergipe/Alagoas*. Relatório interno Petrobras. 1994. 41 p.
- De Gasperi, A. *Caracterização e evolução da água da Formação Muribeca / Membro Carmópolis - Bacia Sergipe/Alagoas*. Relatório interno Petrobras. 1996. 51 p.
- Dickey, P. A. Patterns of chemical composition in deep subsurface waters. *AAPG Bulletin*, v. 50, p. 2472-2478, 1966.
- Elias, V. L., Souza, M. S., Pereira Filho, N. et al. *Organização e análise das propriedades elétricas das rochas das bacias petrolíferas brasileiras*. Relatório interno Petrobras. 1998. 63 p.
- England, W. A. Secondary migration and accumulation of hydrocarbons. In: Magoon, L. B., Dow, W. G, eds. The petroleum system – from source to trap. *AAPG Memoir 60*, p.211-217 1994.
- Feijó, F. J. Bacia de Sergipe e Alagoas. Rio de Janeiro. *Boletim de Geociências da Petrobrás*, v. 8, n. 1, p. 149-161, janeiro-março 1994.
- Folk, R. L., Land, L.S. Mg/Ca ratio and salinity: Two controls over crystallization of dolomite. *AAPG Bulletin*, v. 59, n. 1, p. 60-68, january 1975.
- Galloway, W. E. Hydrogeologic regimes of sandstone diagenesis. In: McDonald, D.A., Surdam, R. C., eds, *Clastic Diagenesis*, *AAPG Memoir 37*, Tulsa, p. 3-13, 1984.
- Garrels, R. M., Christ, C. L. *Solutions, Minerals and Equilibria*. San Francisco, 1965, 450 p.
- Hamsi Junior, G. P. *Geração e expulsão de óleo no Baixo do Mosqueiro*. Relatório interno Petrobras. 1998, 14 p.

- Hanor, J.S. Origin and migration of subsurface sedimentary brines. *SEPM short course*, n. 21, 1987.
- Hehl, M. E. *Linguagem de programação estruturada – Fortran 77*. 2ª ed. São Paulo: Mc Graw-Hill do Brasil, 1987.
- Hubbert, M.K. Entrapment of petroleum under hydrodynamic conditions. *AAPG Bulletin*, v. 37, p. 1954-2026, 1953.
- Lagasa, A. C. The treatment of multi-component diffusion and ion pairs in diagenetic fluxes. *American Journal of Sciences*, v. 279, p. 324-346, 1979.
- Larter, S. R., Aplin, U. Production applications of reservoir geochemistry: A current and long-term view. *SPE 28375*, p.105-113, 1994.
- Larter, S. R., Corbett, N., Mei Chen, P. N. Reservoir geochemistry: A link between reservoir geology and engineering ? *SPE 28849*, p.441-450, 1994.
- Lide, D. R. CRC Handbook of chemistry and physics. 78ª ed. New York: CRC Press, 1997.
- Luvizotto, J. M. Metodologia para a determinação de correlações de propriedades de fluidos. In: 1º SEMINÁRIO DE AVALIAÇÃO DAS FORMAÇÕES E ENGENHARIA DE RESERVATÓRIOS DA PETROBRAS, Set., 1993. p. 49-62.
- Luvizotto, J. M., Paraizo, P. L. B., Palagi, C. L. *A influência de diferentes níveis de caracterização do reservatório na previsão do comportamento de produção*. Relatório interno Petrobras. 1996. 13 p.
- Magoon, L. B., Dow, W. G. The petroleum system. In: Magoon, L. B., Dow, W. G, eds. The petroleum system – from source to trap. *AAPG Memoir 60*, p.3-24 1994.

- McDuff, R. E., Ellis, R. A. Determining diffusion coefficients in marine sediments: a laboratory study of the validity of resistivity techniques, *American Journal of Sciences*, v. 279, p. 666-675, 1979.
- Mello, M. R., Koutsoukos, E. A. M., Mohriak, W. U. et al. Select petroleum systems in Brazil. In: Magoon, L. B., Dow, W. G, eds. The petroleum system – from source to trap. *AAPG Memoir 68*, 1993.
- Mendes, José Milton C. *Análise estratigráfica da seção Neo-Aptiana / Eocenomaniana (Fm Riachuelo) na área do Alto de Aracaju e adjacências - Bacia de Sergipe/Alagoas*. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1994. Tese (mestrado).
- Nordstrom, D. K., Munoz, J. L. *Geochemical Thermodynamics*. 2ª ed. Cambridge: Blackweel Scientific Publications, 1994. Cap. 1: Equilibrium, disequilibrium, and the steady state, p. 1-13.
- Pires, Luís Carlos Gomes. *Influência das heterogeneidades estruturais e estratigráficas na simulação de fluxo: um exemplo de afloramento, Bacia de Taubaté – SP*. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 120 p. Dissertação (mestrado).
- Power, W. L., Tullis, T. E. Review of the fractal character of natural fault surfaces with implications for friction and the evolution of fault zones. In: Barton, C. C., La Pointe, R., *Fractals in the Earth Sciences*, New York, Plenum Press, p. 89-105, 1995.
- Rambo, L. *Evolução tectônica da Bacia de Sergipe – Comunicação verbal*. Aracaju: Petrobras. 1999.

- Ranganathan, V. Salt diffusion in interstitial waters and halite removal from sediments: Examples from the Red Sea and Illinois basins. *Geochimica et Cosmochimica Acta.*, v. 55, p. 1615-1625, 1991.
- Rittenhouse, G. Bromine in oil-field waters and its use in determining possibilities of origin of these waters. *AAPG Bulletin*, v. 51, n. 12, p. 2430-2440, december 1967.
- Schiozer, D. J. Fundamentos de simulação numérica de reservatórios. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. 1995.
- Silva, G. A., Palagi, C. L. *Tratamento de dados de permeabilidade relativa da Formação Muribeca / Membro Carmópolis*. Relatório interno Petrobras.1993.
- Souto Filho, João de Deus. *Utilização de simulador numérico na análise do processo de migração secundária de petróleo*. Campinas: Instituto de Geociências, Universidade Estadual de Campinas, 1994. 164 p. Dissertação (mestrado).
- Souza, Rogério Schiffer. *Litofácies e diagênese do Membro Carmópolis, Formação Muribeca (Cretáceo), Bacia de Sergipe-Alagoas, Brasil*. Rio de Janeiro: Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1989. 200 p. Tese (mestrado).
- Souza, R. S. Dolomite diagenesis and porosity preservation in lithic reservoirs: Carmópolis Member, Sergipe-Alagoas Basin, Northeastern Brazil. *AAPG Bulletin*, v. 79, n. 5, p. 725-748, may 1995.
- Spiegel, M. R. *Manual de fórmulas e tabelas matemáticas*. São Paulo: Mc Graw-Hill do Brasil, 1973.
- Stiff, H.A. The interpretation of chemical water analysis by means of patterns. *Journal of Petroleum Technology*, v.3, p. 15-17, 1951.

Tissot, B. P., Welte, D.H. *Petroleum formation and occurrence*. 2^a ed. Berlin: Springer-Verlag, 1984. Cap. 4: Secondary migration and accumulation, p. 341-356.

Trevisan, O. V. Notas de aula de escoamento em meios porosos. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. 1998.

Apêndice A

Resolução Analítica da Equação da Difusão Iônica

A proposta deste apêndice é apresentar a resolução analítica da equação da difusão iônica (A1), na sua forma unidimensional para meios homogêneos, com o objetivo de validar a solução numérica obtida através do simulador.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (\text{A1})$$

As deduções a seguir são adaptações da resolução da equação de escoamento em coordenadas Cartesianas (Trevisan, 1998), para a função concentração.

Inicialmente é feita a adimensionalização das variáveis envolvidas. Este procedimento consiste em fazer as grandezas variarem entre zero e um, e tem por objetivo transformar um problema físico em matemático. A vantagem desta transformação é que as soluções valem para uma classe de problemas e não para casos específicos, como distância em metros, concentração em gramas por litro, etc...

Assim:

A adimensionalização do espaço (x), considerando que x pode variar até L , é:

$$x_D = \frac{x}{L} \quad (\text{A2})$$

onde:

x_D – distância adimensional

A adimensionalização da concentração (C), considerando que C varia entre C_1 (máximo) e C_2 (mínimo), é:

$$C_D = \frac{C - C_2}{C_1 - C_2} \quad (\text{A3})$$

onde:

C_D – concentração adimensional

Adimensionalizando o tempo (t), considerando que:

$$t_D = \frac{t}{\Delta t} \quad \text{e} \quad t \sim \Delta t$$

e que, da equação da difusão,

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} \sim D \frac{\Delta C}{L^2} \quad \therefore \quad \Delta t \sim \frac{L^2}{D}$$

temos:

$$t_D = \frac{Dt}{L^2} \quad (\text{A4})$$

onde:

t_D – tempo adimensional

Substituindo as variáveis adimensionais na Equação A1, chega-se a seguinte expressão para a equação da difusão adimensional:

$$\frac{\partial C_D}{\partial t_D} = \frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} \quad (A5)$$

onde o coeficiente de difusão D está embutido no tempo adimensional.

Como a Equação A5 é uma equação diferencial parcial que não tem solução no campo real, ela será resolvida no campo de Laplace. Este tipo resolução necessita que sejam feitas considerações a respeito das condições iniciais (CI), condições de contorno interno (CCi) e de contorno externo (CCe) do problema.

Neste caso vamos assumir um sistema infinito, com concentração constante na fronteira interna. Assim as condições físicas do problema são:

CI:	$t = 0,$	$C = C_2$
CCi	$x = 0,$	$C = C_1$
CCe	$x \rightarrow \infty,$	$C \rightarrow C_2$

e as condições matemáticas:

CI:	$t_D = 0,$	$C_D = 0$
CCi	$x_D = 0,$	$C_D = 1$
CCe	$x_D \rightarrow \infty,$	$C_D \rightarrow 0$

Aplicando a transformada de Laplace (A6) (equação 29.2.1, Abramowitz e Stegun, 1970) na equação diferencial adimensional (A5)

$$F(s) = \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt \quad (\text{A6})$$

chega-se a expressão:

$$\int_0^{\infty} \frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} e^{-st_D} dt_D = \int_0^{\infty} \frac{\partial C_D}{\partial t_D} e^{-st_D} dt_D \quad \therefore$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_D^2} \int_0^{\infty} C_D e^{-st_D} dt_D = C_D e^{-st_D} \Big|_0^{\infty} + s \int_0^{\infty} C_D e^{-st_D} dt_D \quad (\text{A7})$$

Fazendo:

$$\overline{C_D} = \int_0^{\infty} C_D e^{-st_D} dt_D \quad (\text{A8})$$

e aplicando a condição inicial, temos:

$$\frac{d^2 \overline{C_D}}{dx_D^2} = 0 - C_{D(t_D=0)} + s \overline{C_D} \quad \therefore \quad \frac{d^2 \overline{C_D}}{dx_D^2} = s \overline{C_D} \quad (\text{A9})$$

que é uma equação ordinária, no campo de Laplace, cuja solução geral é:

$$\overline{C_D} = C_1 e^{\sqrt{s} x_D} + C_2 e^{-\sqrt{s} x_D} \quad (\text{A10})$$

Aplicando as condições de contorno externo ($x_D \rightarrow \infty, C_D \rightarrow 0$) na equação A10, tem-se:

$$\lim_{x_D \rightarrow \infty} \overline{C}_D = \lim_{x_D \rightarrow \infty} (C_1 e^{\sqrt{s}x_D} + C_2 e^{-\sqrt{s}x_D}) = 0 \quad (\text{A11})$$

Logo:

$$C_1 = 0 \quad (\text{A12})$$

Aplicando as condições de contorno interno ($x_D = 0, C_D = 1$) nas equações A8 e A10, tem-se:

$$\overline{C}_D = \int_0^{\infty} I e^{-st_D} dt_D \quad \therefore \quad \overline{C}_D = -\frac{I}{s} e^{-st_D} \Big|_0^{\infty} \quad \therefore \quad \overline{C}_D = -\left(0 - \frac{I}{s}\right) \quad \therefore$$

$$\overline{C}_D = \frac{I}{s} \quad (\text{A13})$$

e

$$\overline{C}_D = C_2 e^{-\sqrt{s}0} \quad \therefore \quad \overline{C}_D = C_2 \quad (\text{A14})$$

Logo:

$$C_2 = \frac{I}{s} \quad (\text{A15})$$

Desta forma a solução particular no campo de Laplace fica:

$$\overline{C}_D = \frac{I}{s} e^{-\sqrt{s}x_D} \quad (\text{A16})$$

A volta do espaço de Laplace para o campo real é realizada através da transformada inversa de Laplace, (equação 29.3.83, Abramowitz e Stegun, 1970), chegando-se a seguinte solução analítica para a função concentração adimensional:

$$C_D = \operatorname{erfc}\left(\frac{x_D}{2\sqrt{t_D}}\right) \quad (\text{A17})$$

A forma gráfica da função concentração é obtida substituindo a função erro complementar (*erfc*) na equação A17. Este procedimento pode ser feito numericamente uma vez que a função *erfc* está disponível em aplicativos de matemática e até mesmo no *Fortran PowerStation™* da *Microsoft*.