MURILO CESAR LUCAS

**Migração de solutos em basalto fraturado: Quantificação experimental em
laboratório e validação matemática**

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos

2016

MURILO CESAR LUCAS

**Migração de solutos em basalto fraturado: Quantificação experimental em
laboratório e validação matemática**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de
São Carlos como parte dos requisitos para a
obtenção do Título de Doutor em Ciências:
Engenharia Hidráulica e Saneamento.

Orientador: Prof. Tit. Edson Cezar Wendland

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos

2016

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Lucas, Murilo Cesar.

L933m

Migração de solutos em basalto fraturado: Quantificação experimental em laboratório e validação matemática/ Murilo Cesar Lucas; orientador Edson Wendland. São Carlos, 2016.

Tese (Doutorado – Programa de Pós-Graduação e Área de Concentração em Engenharia Hidráulica e Saneamento e Área de Concentração em Hidráulica e Saneamento) -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2016.

1. Advecção-dispersão. 2. *Breakthrough curve*. 3. Espectrofotometria. 4. Lei Cúbica. 5. Microtomografia de raios-X. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **MURILO CÉSAR LUCAS**.

Título da tese: "Migração de solutos em basalto fraturado: quantificação experimental em laboratório e validação matemática".

Data da defesa: 09/03/2016

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof. Titular **Edson Cezar Wendland (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Titular **Woodrow Nelson Lopes Roma**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Associado **Oscar Maurício Hernandez Rodriguez**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Dr. **Didier Gastmans**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP – Rio Claro)

Aprovado

Prof. Dr. **Everton de Oliveira**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP – Rio Claro)

APROVADO

Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Hidráulica e Saneamento:

Prof. Associado **Maria Bernadete A. Varesche Silva**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:

Prof. Associado **Paulo César Lima Segantine**

À minha família.

AGRADECIMENTOS

Esta seção me lembra que ninguém faz nada sozinho nesta vida.

Em primeiro lugar a Deus, que é luz nas minhas trevas. “O meu passado, Senhor, à Tua Misericórdia. O meu presente, ao Teu amor. O meu futuro, à Tua Providência” (São Padre Pio).

Aos meus pais Lucas e Elaine. Muito obrigado por tudo que vocês fazem por mim! Amo vocês!

À minha joia rara, Graziela. Obrigado por permanecer ao meu lado com amor e paciência, sempre (sempre mesmo) me motivando, dando forças quando eu estava prestes a cair, rindo quando eu ria. Obrigado por tudo, meu amor!

Ao professor Edson Wendland, por ser um ótimo orientador, exemplo de dedicação e honestidade. Foi um privilégio trabalhar com o senhor. A você, meu grande professor, muitíssimo obrigado!

Ao meu bom amigo, o padre Paulo Mazzi da Paróquia de São Benedito de Jaboticabal. Obrigado me dar a oportunidade de fazer o bem às pessoas. Você me ensinou, entre tantas coisas, que na época em que vivemos há um combate a ser travado, não só em termos de sobrevivência, mas, sobretudo, de espiritualidade, de defesa de valores e princípios que nos mantenham no caminho da justiça e da santidade.

Aos meus amigos e colegas, dos mais antigos aos mais novos, do Laboratório de Hidráulica Computacional. Obrigado pela ótima convivência, ensinamentos e companheirismo!

Aos meus amigos Paulo Tarso e Dulce. Obrigado pela valiosa amizade e ajuda!

Ao técnico Roberto Bérnago, pela ajuda nos trabalhos de campo na Pedreira Bandeirantes e pelas soluções criativas na construção do meu aparato experimental.

À Sá, que foi sempre eficiente e prestativa. Acima disso, obrigado pelas conversas motivadoras!

Ao Grupo Bandeirantes, em especial ao Sr. Moacir, pela colaboração prestada. Aos funcionários: Cesar de Souza, Arnaldo Lopes, Aparecido Ferreira, Sidney Teixeira, Carlos Roberto, Márcio Custódio, Isaías Bernader, Arlan Santana, Ernoni, Mauro, Hercide Matos, Alvino, Moacir, Valdemir Linari, Sandoval de Freitas, Claudinei de Carvalho. Muito obrigado pela ajuda voluntária de vocês!

Aos colegas que me ajudaram nessa pesquisa: Woodrow Roma, Ivan Marin, Caio Cainã, Gabriel Cantareira, Jaime Gómez-Hernández, Lino Misoguti, Amélia Fernandes e Francisco

Negri, Fernando Paulovich, Carlos Manoel Vaz, Paulo Lasso, Aparecido Amorim e Marcos Semenzato.

Aos meus amigos da UNIFAL que me acolheram em Poços de Caldas: prof. Rafael Tiezzi e prof. Rafael Brito.

Aos funcionários da Escola de Engenharia de São Carlos.

Ao CNPq pela concessão da bolsa de doutorado e pelo financiamento do projeto.

“Não sei se a vida é curta ou longa para nós, mas sei que nada do que vivemos tem sentido, se não tocarmos o coração das pessoas.

Muitas vezes, basta ser: colo que acolhe, braço que envolve, palavra que conforta, silêncio que respeita, alegria que contagia, lágrima que corre, olhar que acaricia, desejo que sacia, amor que promove.

E isso não é coisa de outro mundo, é o que dá sentido à vida. É o que faz com que ela não seja nem curta, nem longa demais, mas que seja intensa, verdadeira, pura enquanto durar. Feliz aquele que transfere o que sabe e aprende o que ensina.

(Cora Coralina)

RESUMO

LUCAS, M. **Migração de solutos em basalto fraturado: Quantificação experimental em laboratório e validação matemática**. 2016. 133p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

A avaliação do risco a contaminação e a escolha de técnicas de remediação de poluentes em aquíferos fraturados depende da quantificação dos fenômenos envolvidos no transporte de solutos. A geometria da fratura, usualmente caracterizada pela abertura, é o principal parâmetro que indiretamente controla o transporte nos aquíferos fraturados. A simplificação mais comum desse problema é assumir que as fraturas são um par de placas planas e paralelas, isto é, com uma abertura constante. No entanto, por causa do limitado número de trabalhos experimentais, não está esclarecida a adequabilidade do uso de uma abertura constante para simular o transporte conservativo em fraturas do Aquífero Serra Geral (ASG), Brasil. O objetivo deste trabalho é avaliar a influência da abertura de uma fratura natural do Aquífero Serra Geral sob o transporte conservativo de solutos. Uma amostra natural de basalto fraturado foi usada em um experimento hidráulico e de transporte de um traçador conservativo (escala de laboratório). O campo de abertura foi medido usando a técnica avançada, de alta resolução e tridimensional, chamada microtomografia computadorizada de raios-X. A concentração de traçador medida foi utilizada para validar uma solução analítica unidimensional da Equação de Advecção-dispersão (ADE). O desempenho do ajuste da ADE às curvas de passagem experimentais foi avaliado para quatro diferentes tipos de aberturas constantes. Os resultados mostraram que o escoamento de água e o transporte de contaminantes pode ocorrer através de fraturas micrométricas, ocasionando, eventualmente, a contaminação do ASG. A abertura de balanço de massa é a única que pode ser chamada propriamente de “abertura equivalente”. O uso de aberturas constantes na ADE não permitiu representar completamente o formato das curvas de passagem porque o campo de velocidade não é uniforme e intrinsecamente bidimensional. Portanto, na simulação do transporte deve-se incorporar a heterogeneidade da abertura da fratura.

Palavras-chave: Advecção-dispersão, *Breakthrough curve*, Espectrofotometria, Lei Cúbica, Microtomografia de raios-X.

ABSTRACT

LUCAS, M. **Solute migration in fractured basalt: Bench-scale laboratory tests and mathematical validation**. 2016. 133p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

The contamination risk assessment and the choice of suitable cleanup techniques for pollutants in fractured rock depends on the quantification of the transport phenomena. Fracture geometry often described by the apertures is the major parameter that controls indirectly solute transport in fractured rock. The simplest approach is describing fractures as a pair of smooth parallel plates with constant aperture. However, there is a lack of information about the suitability for using a constant aperture for the conservative solute transport prediction in a single fracture of Serra Geral Aquifer (SGA), Brazil. The aim of this work is to evaluate the effect of aperture variability in a natural single rough-walled fracture of Serra Geral Aquifer on conservative solute transport. A natural core of fractured basalt was used for a hydraulic and tracer tests (laboratory scale). The aperture field was measured using the advanced, high-resolution and tridimensional technique X-ray computed tomography. The measured tracer concentration was validated by means of an analytical solution of the Advection-dispersion Equation (ADE). The ADE fit performance was measured against experimental breakthrough curves for four distinct kind of constant apertures. It was found that water flow and solute transport can take place through micrometric fractures, eventually leading the SGA contamination. Results show that the mass balance aperture is the only appropriate “equivalent aperture” for describing solute transport in a single rough-walled fracture. The results showed that ADE is not appropriate for modeling the complete behavior of experimental breakthrough curves because of the dimensional non-uniform velocity field. Therefore, the aperture heterogeneity must be considered in solute transport simulation.

Keywords: Advection-dispersion, *Breakthrough curve*, Cubic law, Spectrophotometry, X-ray microtomography.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Vista frontal de fraturas em um afloramento de rocha basáltica, no município de São Carlos-SP. Fonte: Arquivo do autor.	25
Figura 2 – Modos de ruptura e propagação das fraturas: por distensão (Modo I), por cisalhamento com deslizamento paralelo (Modo II) e por cisalhamento com deslizamento perpendicular (Modo III). As setas em cor preta indicam a direção e o sentido da tensão aplicada. Fonte: Fiume (2013).	26
Figura 3 – Representação das tensões mínima e máxima principais (σ_1 e σ_3 , respectivamente) em uma rocha. A propagação da fratura ocorre por cisalhamento, com formação de pares conjugados. Fonte: Adaptado de Fossen (2010).	27
Figura 4 – Orientação das fraturas extensionais (linha tracejada) e de cisalhamento (linha contínua), de acordo com os regimes tectônicos: (i) regime de fraturas normais, (ii) regime de fraturas inversas e (iii) fraturas transcorrentes. Fonte: Fiume (2013).	28
Figura 5 – Exemplo de modelo conceitual de escoamento de águas subterrâneas no aquífero fraturado Serra Geral, região de Ribeirão Preto-SP. Fonte: Fernandes <i>et al.</i> (2011).	29
Figura 6 – Posicionamento da fita graduada para aplicação da técnica <i>scanline</i> horizontal. Fonte: Santos e Pereira (2004).	29
Figura 7 – Contato ondulado entre colunata (abaixo da linha vermelha tracejada) e entablamento (acima da linha tracejada) em um afloramento do município de Ribeirão Preto-SP. Fonte: Arquivo do autor.	30
Figura 8 – Representação bidimensional de uma fratura com paredes rugosas. A abertura, b , pode ser considerada como a medida da distância vertical entre as rugosidades da parede em uma mesma posição (y). Fonte: Arquivo do autor.	31
Figura 9 – Presença de canais preferenciais em uma fratura rugosa (escala de laboratório). As cores azuis representam o escoamento de água. Fonte: Adaptado de Ishibashi <i>et al.</i> (2015).	32
Figura 10 – Distribuição de frequência logarítmica para valores de abertura em uma amostra indeformada fraturada (área = 142 m ²) da região de Trans-Pecos, Texas, EUA.	33
Figura 11 – Características de um variograma. Fonte: Adaptado de Chiverton <i>et al.</i> (2015).	36
Figura 12 – Função variograma (teórica) do tipo gaussiano, exponencial, esférico e potência. Fonte: Adaptado de Gómez-Hernández (2005).	37
Figura 13 – Duas realizações obtidas para o atributo transmissividade (m ² /dia) do aquífero (arenito) usando a simulação estocástica sequencial. Os maiores e os menores valores de transmissividade estão indicados, respectivamente, pelas cores vermelho e azul.	38
Figura 14 – Perfil unidimensional da superfície de uma fratura. As linhas em vermelho indicam a característica de invariância da rugosidade da fratura. Fonte: Candela <i>et al.</i> (2009).	40
Figura 15 – Superfície rugosa de uma fratura gerada a partir da teoria fractal. A dimensão fractal usada foi igual a 2,5. Fonte: Brown (1987).	41
Figura 16 – Representação da vazão (Q) entre placas planas paralelas com abertura constante (b); altura da placa (H) e comprimento (W) Fonte: Klimczak <i>et al.</i> (2010).	43
Figura 17 – Representação esquemática das alterações na abertura de uma fratura por causa da dissolução química: (a) é o primeiro estágio temporal de dissolução e (b) é um segundo estágio de dissolução. A linha	

tracejada indica o critério para definição de uma abertura média, $\langle b \rangle$. Deve-se ressaltar que o fluido não necessariamente irá escoar dentro da baixa delimitada por $\langle b \rangle$. Fonte: Adaptado de Noiriel <i>et al.</i> (2013).	44
Figura 18 – Distribuição da abertura média (linha contínua) e comparação com a distribuição de probabilidade normal (linha tracejada) em diferentes estágios temporais (t) de um experimento de dissolução uma única fratura. Fonte: Adaptado de Noiriel <i>et al.</i> (2013).	44
Figura 19 – Três técnicas para medição da geometria da fratura. Fonte: Hakami <i>et al.</i> (1995).	45
Figura 20 – Fotografia digital do molde usando um microscópio acoplado a uma câmera. A imagem digital apresenta a fratura com 4 mm de comprimento. O tamanho das linhas internas (cor preta) indica a medida de abertura ao longo do comprimento da fratura.	46
Figura 21 – Exemplo de uma fatia de fratura (material de concreto) preenchida com resina epóxi (técnica de injeção de resina). O perfil em azul é a delimitação da resina epóxi e o gráfico de linhas representa os valores de abertura em função da espessura da resina.	47
Figura 22 – Fatia (2D) de uma amostra cilíndrica de basalto (não fraturado) obtida por meio da técnica micro-CT. Os minerais mais atenuantes são representados pela cor branca, enquanto os menos atenuantes são mostrados em cor escura. Fonte: Arquivo do autor.	49
Figura 23 – Representação esquemática de um sistema de microtomografia computadorizada de raios-X. Fonte: Adaptado de Kyle e Ketcham (2015).	50
Figura 24 – (a) Representação tridimensional obtida pela técnica de micro-CT de um objeto fraturado, após a aplicação de técnicas de processamento digital e imagem; (b) Representação tridimensional das fraturas mostradas em (a). Fonte: Voorn <i>et al.</i> (2013).	51
Figura 25 – Curvas de passagem normalizadas (concentração, C e massa, M) e curva de recuperação (ROB) para os solutos injetados (piranina e cádmio) em uma fratura de arenito. Fonte: Adaptado de Wendland e Himmelsbach (2002).	54
Figura 26 – Representação esquemática mostrando: (a) transporte advectivo em uma rede de fraturas sem o efeito da difusão através da matriz rochosa; (b) difusão molecular entre a matriz rochosa e a fratura. A fratura é representada pela cor branca e a matriz rochosa pela cor cinza claro. As setas em cor preta indicam a direção do transporte advectivo e as setas em cor cinza indicam o transporte entre a fratura e a matriz rochosa. Fonte: Berkowitz <i>et al.</i> (2008).	55
Figura 27 – Representação esquemática do Self-Consistent Model mostrando o escoamento uniforme (U), as inomogeneidades circulares (esferas de cor cinza claro) e as linhas equipotenciais no plano z dentro do domínio. Fonte: Jankovic <i>et al.</i> (2006).	56
Figura 28 – Transporte conservativo de traçador em uma fratura feita de resina. As maiores concentrações são representadas pela cor vermelha. O tempo de análise, t^* , foi adimensionalizado usando a razão entre a vazão e o volume da fratura.	57
Figura 29 – Localização do afloramento Bandeirantes próximo a cidade de São Carlos. O município de São Carlos está indicado pela cor vermelha. Fonte: Arquivo do autor.	59
Figura 30 – Parede de rocha basáltica do afloramento Bandeirantes. Fonte: Arquivo do autor.	60
Figura 31 – (a) Identificação na parede das possíveis fraturas a serem extraídas e (b) marcação do bloco de rocha contendo a fratura identificada na parede. Fonte: Arquivo do autor.	61

Figura 32 – (a) Perfuratriz acoplada à serra de corte cilíndrica (10 cm de diâmetro) posicionada para perfurar o bloco de rocha contendo uma única fratura; e (b) detalhe da fratura do bloco. Fonte: Arquivo do autor.	61
Figura 33 – (a) Amostra (10 cm de diâmetro) fixada ao bloco rochoso após a perfuração; e (b) o amostrador (objeto de cor laranja) posicionado dentro do furo. Fonte: Arquivo do autor.	62
Figura 34 – (a) Amostra (2,6 cm de diâmetro) fixada ao bloco rochoso após a perfuração; e (b) o amostrador (objeto de cor laranja) posicionado dentro do furo. Fonte: Arquivo do autor.	62
Figura 35 – (a) Amostras pequenas de basalto fraturado; (b) amostra pequena de basalto usada para o ensaio de micro-CT. Fonte: Arquivo do autor.	63
Figura 36 – Área circular utilizada nas imagens de micro-CT. Fonte: Arquivo do autor.	65
Figura 37 – Exemplo de uma imagem de micro-CT após a aplicação do filtro gaussiano com máscaras de 5 pixels nos eixos horizontal e vertical e de 7 pixels apenas no eixo horizontal. Fonte: Arquivo do autor.	66
Figura 38 – Exemplo de uma fatia de imagem binarizada após a aplicação do <i>threshold</i> . Detalhe para os pixels escuros contínuos que formam a fratura no centro da amostra e para os outros pixels escuros isolados na matriz rochosa da amostra. Fonte: Arquivo do autor.	66
Figura 39 – Exemplo de uma fatia de imagem após a aplicação do <i>threshold</i> e da indexação de massas de pixels pretos contínuos. Detalhe para os pixels escuros contínuos que formam a fratura no centro da amostra. Fonte: Arquivo do autor.	67
Figura 40 – (a) Representação esquemática da Amostra de basalto fraturado encaixada entre placas de acrílico, as quais estão fixadas por meio das quatro barras de alumínio com rosca. Os retângulos em azul indicam a entrada e saída de água; e (b) Amostra de basalto fraturado (impermeabilizada com resina) encaixada entre placas de acrílico. Fonte: Arquivo do autor.	69
Figura 41 – (a) Fotografia do aparato hidráulico e (b) representação esquemática dos componentes do aparato hidráulico. A seta vermelha indica o sentido do escoamento. Fonte: Arquivo do autor.	70
Figura 42 – (a) Seringa usada para a injeção do traçador; e (b) seringa (parcialmente preenchida com o traçador) encaixada na bomba de seringa. Fonte: Arquivo do autor.	74
Figura 43 – Detalhe da agulha dentro de uma das vias do septo de entrada. O volume de água dentro do orifício em que o septo foi encaixado é de ~1,60 mL. Fonte: Arquivo do autor.	74
Figura 44 – (a) Espectrofotômetro Ocean Optics conectado a um cabo USB e à fibra óptica; e (b) Computador mostrando a tela de aquisição de medidas de intensidade de luz do <i>software SpectraSuite</i> . Fonte: Arquivo do autor.	75
Figura 45 – (a) Sistema <i>inline</i> de monitoramento da concentração do traçador na saída da fratura; (b) Detalhe da cela de fluxo, lâmpada de LED azul e da fibra óptica; e (c) Detalhe da cela de fluxo em formato de Z. O LED e a fibra óptica estavam posicionados para execução do experimento de absorbância. Fonte: Arquivo do autor.	76
Figura 46 – Sistema <i>inline</i> de monitoramento da concentração do traçador fluorescente (Uranina). Fonte: Arquivo do autor.	77
Figura 47 – Campo de abertura da fratura. Caso essa amostra fosse utilizada para o ensaio hidráulico, o escoamento ocorreria da esquerda para a direita. A escala de cores indica ausência de abertura (valor 0 μm) e máxima abertura (500 μm). Fonte: Arquivo do autor.	83

- Figura 48 – (a) Representação 3D da amostra fraturada; (b) fotografia digital da vista superior da amostra pequena e (c) representação tridimensional (vista superior). Os retângulos vermelhos são regiões de controle para comparação entre (b) e (c). Fonte: Arquivo do autor. 84
- Figura 49 – (a) Fatia da amostra de basalto fraturado. O retângulo vermelho representa alguns pixels duvidosos (possíveis contatos entre as paredes da fratura). (b) Seção (linha amarela) sob a qual foram obtidos os níveis (ou tons) de cinza; e (c) Níveis de cinza da fratura observada na seção destacada em (a). Fonte: Arquivo do autor. 85
- Figura 50 – (a) Gráfico Quantil-Quantil e (b) histograma de aberturas, mostrando que as aberturas seguem uma distribuição de probabilidade lognormal com assimetria (*skewness* = 0,67 e *kurtosis* = 4,11). Fonte: Arquivo do autor. 87
- Figura 51 – Resultado experimental entre a vazão e o gradiente hidráulico dentro da fratura da amostra grande. A linha azul é o ajuste linear e a barra de erros representa o desvio-padrão de cada medida. Fonte: Arquivo do autor. 89
- Figura 52 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,095 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 91% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de ~15 minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor. 91
- Figura 53 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-02) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,238 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 99% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de ~6,3 minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor. 92
- Figura 54 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-03) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,331 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 92% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de ~4,3 minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor. 94
- Figura 55 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,095 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 91% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica. 96
- Figura 56 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-02) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,238 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 99% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base

na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica. 97

Figura 57 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-03) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,331 mL.min⁻¹ e 0,01 mg e 92% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica. 98

Figura 58 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A velocidade média do escoamento foi calculada considerando o desvio-padrão (47,4 µm) da média de b_e . A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,095 mL.min⁻¹ e 0,01 mg. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor. 99

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Testes estatísticos de normalidade dos valores de abertura. A hipótese nula é a de que os dados seguem uma distribuição do tipo normal.	86
Tabela 2 – Valores das “aberturas equivalentes” e volume da fratura (amostra grande).....	88
Tabela 3 – Resultado dos parâmetros usados na simulação do transporte conservativo.	90

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	20
1.1 OBJETIVO	23
1.1.1 Objetivo geral	23
1.1.2 Objetivos específicos	23
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1 MEIO POROSO FRATURADO E MEIO FRATURADO	25
2.2 GÊNESE DE FRATURAS	26
2.3 CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DE BASALTOS EM AFLORAMENTOS	28
2.4 GEOMETRIA DAS FRATURAS.....	31
2.4.1 Abertura variável: simulação estocástica sequencial	32
2.4.2 Abertura variável: simulação estocástica fractal	39
2.4.3 Abertura constante.....	41
2.5 TÉCNICAS DE MEDIÇÃO DA GEOMETRIA DA FRATURA	45
2.5.1 Superfície topográfica, injeção de resina e molde de resina	45
2.5.2 Microtomografia computadorizada de raios-X.....	48
2.6 ESCOAMENTO DE FLUIDOS EM UMA ÚNICA FRATURA.....	52
2.7 TRANSPORTE DE SOLUTOS EM UMA ÚNICA FRATURA	53
3. MATERIAIS E MÉTODOS	59
3.1 COLETA DAS AMOSTRAS DE BASALTO.....	59
3.2 MEDIÇÃO DA GEOMETRIA DA FRATURA	63
3.2.1 Microtomografia computadorizada de raios-X.....	63
3.2.2 Processamento digital das imagens de micro-CT	64
3.3 MONTAGEM DO APARATO HIDRÁULICO	68
3.4 CÁLCULO DA ABERTURA DA FRATURA.....	71
3.5 INJEÇÃO E MONITORAMENTO DO TRAÇADOR	73
3.6 SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DENTRO DA FRATURA.....	78
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	83
4.1 ABERTURA DA FRATURA.....	83
4.2 REGIME DE ESCOAMENTO	88
4.3 TRANSPORTE DE SOLUTOS	90
4.3.1 Solução analítica com abertura constante	90
5. CONCLUSÃO.....	103
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	105
7. ANEXOS.....	121

CAPÍTULO 1

Introdução e Objetivo

1. INTRODUÇÃO

Entre os atuais desafios científicos que os hidrogeólogos enfrentam, caracterizar o escoamento de fluidos e o transporte de poluentes no meio geológico fraturado é um dos mais complexos (Faybishenko e Benson, 2000). As formações geológicas fraturadas estão presentes em todo o mundo e são de grande importância, por exemplo, como reservatório de exploração de petróleo (Watanabe *et al.*, 2011) e de água para abastecimento público. A principal motivação das pesquisas internacionais sobre esse assunto tem sido a possibilidade da utilização do meio geológico fraturado como repositório de resíduos radioativos e de gás carbônico e como reservatório de energia geotérmica (Bonnet *et al.*, 2001; Szulczewski *et al.*, 2012; Nowamooz *et al.*, 2013).

O termo “fraturas” refere-se às descontinuidades presentes em um bloco rochoso (Bear *et al.*, 1993). Para os propósitos da modelagem numérica de escoamento de fluidos, não é necessária uma distinção mais rigorosa entre os termos fraturas, falhas, junções, rachaduras e fissuras (Berkowitz, 2002). A presença de fraturas é crítica no escoamento de água e no transporte de solutos, porque se apresentam como um caminho preferencial para a água e também para os poluentes (Amundsen *et al.*, 1999). Os estudos apresentados nas últimas três décadas mostraram que o escoamento de água e o transporte de poluentes em uma fratura individual depende (quase) exclusivamente da geometria da fratura (Berkowitz, 2002; Neuman, 2005).

O formato geométrico da fratura é uma estrutura tridimensional complexa (Hakami e Larsson, 1996), usualmente caracterizada por meio da abertura ao longo de todo o comprimento da fratura. Devido às rugosidades naturais das paredes da fratura, a abertura é uma medida heterogênea, a qual pode possuir alto grau de variabilidade. Além disso, podem haver locais específicos no plano da fratura em que as paredes possuem contato entre si, diminuindo a abertura.

Uma das dificuldades ao lidar com o meio fraturado é a limitação tecnológica de medição da geometria das fraturas. A microtomografia de raios-X (micro-CT) é uma técnica física não destrutiva que fornece como produto imagens 3D do interior de objetos sólidos. Essa técnica tem sido usada por vários grupos de pesquisa para obter imagens e medidas de fraturas em rochas (Gouze *et al.*, 2003; Cardenas *et al.*, 2007; Ketcham *et al.*, 2010; Huber *et al.*, 2012) com resultados promissores. Devido ao adequado contraste entre o espaço vazio (contendo ar) e a rocha sólida, as imagens geralmente apresentam

suficiente distinção entre o espaço poroso (contendo ar) e a rocha sólida (Ketcham e Carlson, 2001).

A hipótese de que a fratura pode ser considerada um canal de placas planas paralelas, separadas por uma abertura constante (Snow, 1965) tem sido frequentemente empregada. No entanto, experimentos laboratoriais (Raven e Gale, 1985; Durham e Bonner, 1994; Keller *et al.*, 1995; Ishibashi *et al.*, 2015) e de campo (Novakowski *et al.*, 1995; Kang *et al.*, 2015) indicaram que essa descrição da fratura muitas vezes não é adequada para a caracterização do transporte de poluentes. A falha do modelo de placas planas paralelas em explicar muitos resultados está amplamente documentada por Neuman (1987). Wendland e Himmelsbach (2002) mostraram que o modelo de placas paralelas pode ser usado localmente para simulação do escoamento e transporte em fraturas quando o coeficiente de variância da abertura é pequeno ($\leq 0,20$). Quando a rugosidade da fratura aumenta, isto é, a razão entre a abertura média e a variância da abertura diminui (Liu e Neretnieks, 2006), diferenças a partir do modelo de placas paralelas são esperadas (Wendland e Himmelsbach, 2002; Noiriél *et al.*, 2013).

A variabilidade da abertura pode ser caracterizada por funções densidade de probabilidade e por um comprimento de correlação espacial (Neuman, 2008). Segundo Wendland e Himmelsbach (2002), é pouco provável que a variação de aberturas naturais da fratura seja um processo unicamente aleatório, isto é, sem correlação espacial. As funções de distribuição de abertura fornecem a probabilidade que pontos com certa abertura ocorram no plano da fratura. As distribuições contínuas do tipo normal (Oron e Berkowitz, 1998; Matsuki *et al.*, 2006; Schmittbuhl *et al.*, 2008; Neuville *et al.*, 2012) e lognormal (Moreno e Tsang, 1994; Zimmerman e Bodvarsson, 1996; Keller, 1998; Nowamooz *et al.*, 2013) têm sido os mais adequados.

A heterogeneidade da abertura ocasiona variações de velocidades do fluido dentro do plano da fratura. Diversos estudos (Watanabe *et al.*, 2008; Becker e Tsoflis, 2010; Wang e Cardenas, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015) têm reportado a presença de caminhos preferenciais de alta condutividade hidráulica (*channeling*) que permitem o transporte de solutos em pequenas regiões da fratura com velocidade acima da velocidade média. Por isso, a modelagem do transporte de soluto necessita de uma caracterização precisa e acurada do campo de velocidades do escoamento dentro da fratura (Bodin *et al.*, 2003).

Embora a heterogeneidade da abertura possa tornar inadequada a descrição da fratura pelo modelo de placas planas paralelas, os pesquisadores frequentemente consideram conveniente (aceitável) representar o campo de abertura em termos de uma

única “abertura equivalente” (Zheng *et al.*, 2008). Por causa da facilidade de obtenção dos parâmetros, a “abertura equivalente” hidráulica tem sido utilizada na maior parte dos estudos sobre escoamento de água e transporte de contaminantes em fraturas, tanto na escala de campo (Klimczak, 2010), como na de laboratório (Zvikelsky e Weisbrod, 2006). No entanto, a utilização da abertura “equivalente” hidráulica em detrimento da abertura de balanço de massa pode ocasionar erros, os quais podem ser contornados (erroneamente), ajustando outros parâmetros das equações de transporte de solutos (Zheng *et al.*, 2008).

O transporte não reativo (passivo) de solutos através do meio poroso tem sido tradicionalmente descrito pela Equação de Advecção-Dispersão (*Advection–Dispersion Equation*, ADE), baseada em uma analogia à Lei de Fick da difusão (Bear, 1979). Os experimentos laboratoriais e de campo com traçadores em fraturas têm apresentado curvas de passagem com picos de concentração em um curto período e longas caudas (*tailing*) de baixa concentração (Becker e Shapiro, 2000; Wang e Cardenas, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015). Diversos pesquisadores têm mostrado que a ADE não é adequada para ajustar curvas de passagem com picos de concentração em um curto período e longas caudas. Essa característica das curvas de passagem (*breakthrough curves*) é chamada de transporte não Fickiano (ou “anômalo”).

No Brasil as formações geológicas fraturadas são utilizadas principalmente para abastecimento público de água. A Formação Serra Geral é a formação geológica fraturada predominante nos Estados de São Paulo e do Paraná, a qual foi constituída por uma sequência de derrames de lavas vulcânicas (Iritani, 2008). Os basaltos eocretácicos da Formação Serra Geral compõem o Aquífero Serra Geral (ASG) que é utilizado para abastecimento público. A utilização eficiente e sustentável das águas de aquíferos fraturados (como o ASG) pode aliviar a pressão sobre a captação exclusiva de águas superficiais em situações de escassez hídrica.

Alguns estudos científicos publicados na literatura procuram descrever os basaltos fraturados da Formação Serra Geral e os arenitos subjacentes por meio de investigações em campo, usando técnicas geofísicas, análises petrográficas e geoquímicas (Fernandes *et al.*, 2010; Fernandes *et al.*, 2011). O estudo de Fernandes *et al.* (2011) objetivou a elaboração do modelo conceitual de fluxo de água através dos basaltos da Formação Serra Geral em direção ao SAG na região de Ribeirão Preto-SP. Além de conhecer o modelo conceitual de escoamento de água no ASG, é necessário o estudo da influência da abertura da fratura sob o escoamento e transporte de contaminantes, os quais eventualmente podem

poluir o ASG. No Brasil, ainda é raro esse tipo de estudo experimental, principalmente considerando medições da geometria da fratura. As simulações computacionais auxiliam no estudo de transporte de solutos, porém são necessários dados experimentais para validá-las. Por causa do elevado custo com a execução de experimentos de campo (*in situ*), em muitos casos opta-se por experimentos em pequena escala (laboratório). Em escala de laboratório, os mecanismos físicos podem ser controlados com maior facilidade.

Neste trabalho foram questionadas três principais hipóteses científicas: (i) Há escoamento de água através das fraturas micrométricas do ASG?; (ii) Pode-se negligenciar a heterogeneidade da abertura?; e (iii) a Equação de advecção-dispersão (ADE) é adequada para simular o transporte conservativo?

1.1 OBJETIVO

1.1.1 Objetivo geral

O objetivo principal deste trabalho é avaliar, em escala de laboratório, a influência da abertura de uma única fratura natural do Aquífero Serra Geral no transporte conservativo de solutos.

1.1.2 Objetivos específicos

Para que seja atingido o objetivo geral proposto, foram listadas as seguintes etapas de desenvolvimento:

- Avaliar o uso da técnica de microtomografia computadorizada de raios-X e de processamento digital de imagens para a determinação do campo de abertura da fratura de basalto;
- Determinar os parâmetros de transporte de solutos por meio do monitoramento da concentração de um traçador conservativo ao longo do tempo;
- Simular a concentração de um traçador conservativo usando uma solução analítica da ADE.

CAPÍTULO 2

Revisão bibliográfica

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Meio poroso fraturado e meio fraturado

Um material poroso é constituído por duas ou mais fases, sendo uma sólida e as outras líquidas e/ou gasosas. A parte sólida é chamada de matriz sólida (ou matriz rochosa para rochas) e a parte preenchida pelo líquido, gás ou vazia é chamada de espaço vazio ou espaço de poros (Bear *et al.*, 1993). A fratura (Figura 1) é qualquer descontinuidade planar ou subplanar estreita, formadas por tensões externas (tectônicas) ou internas (termal ou residual) em um bloco rochoso (Fossen, 2010).

Figura 1 – Vista frontal de fraturas em um afloramento de rocha basáltica, no município de São Carlos-SP. Fonte: Arquivo do autor.

É importante esclarecer a diferença de nomenclatura entre rochas fraturadas e rochas porosas fraturadas. No primeiro caso, o escoamento é considerado apenas no

interior das fraturas. No segundo, a porosidade da matriz rochosa é incluída junto com as fraturas na descrição do escoamento.

2.2 Gênese de fraturas

A abertura das fraturas depende do modo de propagação da mesma (Lawn e Wilshaw, 1975). A formação e propagação das fraturas pode ocorrer por três mecanismos de ruptura (Figura 2): extensão (Modo I), em que há a propagação do plano de ruptura perpendicularmente às paredes da fratura; e por cisalhamento com deslizamento, em que a ruptura e a propagação ocorrem perpendicularmente (Modo II) ou paralelamente (Modo III) ao plano da fratura.

Figura 2 – Modos de ruptura e propagação das fraturas: por distensão (Modo I), por cisalhamento com deslizamento paralelo (Modo II) e por cisalhamento com deslizamento perpendicular (Modo III). As setas em cor preta indicam a direção e o sentido da tensão aplicada. Fonte: Fiume (2013).

A magnitude dos esforços máximo e mínimo principais (σ_1 e σ_3 , respectivamente), são responsáveis pelo modo de propagação das fraturas (Figura 3). As fraturas do Modo I propagam-se perpendicularmente à tensão mínima principal (σ_3) (Price e Cosgrove,

1990) e podem ser classificadas em dois tipos: extensionais, quando σ_3 é negativo; ou hidrofraturas, quando a pressão total de fluidos for igual à soma de σ_3 com a resistência à tração da rocha (Fernandes, 2008).

Figura 3 – Representação das tensões mínima e máxima principais (σ_1 e σ_3 , respectivamente) em uma rocha. A propagação da fratura ocorre por cisalhamento, com formação de pares conjugados. Fonte: Adaptado de Fossen (2010).

A geração de fraturas de cisalhamento ocorre sob a diferença de tensão ($\sigma_1 - \sigma_3$) compressiva (Fernandes, 2008). Quando a diferença de tensão ($\sigma_1 - \sigma_3$) é igual à resistência de tração da rocha (T_{rocha}), formam-se fraturas extensionais. A ruptura por cisalhamento (Modos II e III) pode apresentar pares conjugados de fraturas, formando ângulo (2θ) tipicamente igual a 60° entre conjugados (Curti, 2010). Como as fraturas híbridas são formadas pelos modos I, II ou III de propagação, ocorre tanto a distensão como o cisalhamento (simultaneamente). O ângulo 2θ entre as fraturas híbridas conjugadas varia entre 1 e 59° (Dunne e Hancock, 1994) e tipicamente menor que 50° . É esperado que a vazão de água seja maior nas fraturas híbridas em relação às fraturas de cisalhamento, pois as fraturas híbridas geralmente possuem aberturas maiores (Fernandes *et al.*, 2012).

A orientação espacial das tensões principais (σ_1 , σ_2 e σ_3) determina a orientação das fraturas. Os regimes tectônicos podem gerar três principais tipos de fraturas ou falhas de cisalhamento (Anderson, 1951): falhas (ou fraturas) normais, inversas ou

transcorrentes (Figura 4). Nos regimes extensional e transcorrente, as fraturas extensionais são subverticais; no regime compressivo, elas são sub-horizontais. As fraturas de cisalhamento são subverticais (falhas transcorrentes) no regime transcorrente; de mergulho médio, em torno de 60° (falhas normais), no regime extensional; e de mergulho baixo, em torno de 30° (falhas inversas), no regime compressivo (Fiume, 2013).

Figura 4 – Orientação das fraturas extensionais (linha tracejada) e de cisalhamento (linha contínua), de acordo com os regimes tectônicos: (i) regime de fraturas normais, (ii) regime de fraturas inversas e (iii) fraturas transcorrentes. Fonte: Fiume (2013).

2.3 Caracterização estrutural de basaltos em afloramentos

O estudo dos padrões (*trends*) de discontinuidades (fraturas, fissuras e falhas) é importante para, por exemplo, a elaboração de modelos conceituais de escoamento de águas subterrâneas em aquíferos (Figura 5). A caracterização dos *trends* de fraturas envolve o registro da frequência, atitude (direção e mergulho), abertura, tipos de preenchimento e rugosidade, geometria do corpo basáltico e feições genéticas (estrias, costelas ou plumas).

O levantamento sistemático de dados por meio das *scanlines* (ou *detail-lines*) horizontais é um dos métodos mais utilizados para caracterizar famílias de fraturas em afloramentos (Marrett, 1996; Ortega *et al.*, 2006). Neste método uma fita graduada (trena) é posicionada paralelamente à face exposta do maciço rochoso (Figura 6), onde são medidas as atitudes de todas as fraturas que a intersectam (Viana, 2015), além da descrição de suas características (número de fraturas, comprimento mínimo e máximo, coloração, presença de preenchimento e abertura, por exemplo).

Figura 5 – Exemplo de modelo conceitual de escoamento de águas subterrâneas no aquífero fraturado Serra Geral, região de Ribeirão Preto-SP. Fonte: Fernandes *et al.* (2011).

É usual que as *scanlines* sejam realizadas em várias paredes de modo a obter um levantamento que seja representativo do afloramento (Fiume, 2013). No levantamento é necessário que seja considerada a orientação da linha de coleta de informações e o comprimento da fratura para que sejam eliminados os possíveis erros causados pela amostragem direcional (Priest e Hudson, 1981). A definição do número de amostras (fraturas) é variável e envolve subjetividade (Priest e Hudson, 1981). Peacock *et al.* (2003) mencionam como desvantagem desta técnica a predominância de fraturas (sub)horizontais no maciço.

Figura 6 – Posicionamento da fita graduada para aplicação da técnica *scanline* horizontal. Fonte: Santos e Pereira (2004).

A distinção entre as fraturas formadas por resfriamento e aquelas formadas pela atuação de esforços tectônicos é parte da análise estrutural de basaltos. Considera-se que a geração tectônica é identificada, por exemplo, pelas seguintes feições:

- Padrões de fraturas conjugadas;
- Zonas de fraturas subparalelas e *trends* bem definidos, indicando que o cisalhamento foi o mecanismo de propagação;
- Fraturas que se propagam em camadas de arenito *intertrape* e com *trends* direcionais bem definidos;
- Presença de planos de falhas com estrias de atrito e degraus perpendiculares;
- Presença de pares de fraturas conjugados.

As fraturas de resfriamento são controladas pelo paleo-relevo e pelo mecanismo de colocação dos basaltos, o qual controla as dimensões e formato dos corpos (Fernandes *et al.*, 2010). O resfriamento dos derrames basálticos se manifesta a partir das extremidades para o centro do derrame. Durante esse processo são geradas juntas de contração por resfriamento da lava, formando, geralmente, fraturas subverticais disjunções colunares em forma de prismas alongados (Curti, 2010). Os termos colunata e entablamento são utilizados para caracterizar as disjunções colunares em basaltos. A colunata ocorre geralmente na parte superior e na base do derrame (Figura 7).

Figura 7 – Contato ondulado entre colunata (abaixo da linha vermelha tracejada) e entablamento (acima da linha tracejada) em um afloramento do município de Ribeirão Preto-SP.

Fonte: Arquivo do autor.

O nível de colunata inferior consiste de colunas relativamente bem formadas, perpendiculares à base do derrame e atinge largura de aproximadamente 30 centímetros a 2 metros (Curti, 2010). O entablamento é o nível intermediário entre a colunata superior e inferior, normalmente ocupando 60 a 70% da espessura do derrame (Curti, 2010).

2.4 Geometria das fraturas

A geometria de uma fratura é uma característica essencial para os processos de escoamento e de transporte que nela ocorrem (Larsson *et al.*, 2013; Tzelepis *et al.*, 2015). Fraturas reais possuem paredes rugosas (Figura 8), onde alguns pontos isolados estão em contato entre si. Por causa dessas rugosidades, é esperado que o fluido se movimente através de caminhos tortuosos dentro da fratura.

Figura 8 – Representação bidimensional de uma fratura com paredes rugosas. A abertura, b , pode ser considerada como a medida da distância vertical entre as rugosidades da parede em uma mesma posição (y). Fonte: Arquivo do autor.

A geometria é usualmente caracterizada por meio da abertura da fratura, b , a qual pode ser definida como a distância entre duas superfícies (z_1 e z_2) na direção perpendicular ao plano principal da fratura (Vilarrasa *et al.*, 2010):

$$b(x, y) = z_2(x, y) - z_1(x, y)$$

Equação 1

Devido às rugosidades naturais das paredes da fratura, a abertura é uma medida heterogênea, a qual pode possuir alto grau de variabilidade (campo de abertura). Na realidade, fraturas rugosas e com constrições (sob atuação de tensões) limitam o escoamento de água a alguns poucos canais preferenciais (Figura 9).

Figura 9 – Presença de canais preferenciais em uma fratura rugosa (escala de laboratório). As cores azuis representam o escoamento de água. Fonte: Adaptado de Ishibashi *et al.* (2015).

2.4.1 Abertura variável: simulação estocástica sequencial

Os parâmetros que caracterizam canais preferenciais de escoamento na fratura são (Tsang e Tsang, 1987): distribuição de probabilidade das aberturas, o comprimento e a largura de cada canal individual e o comprimento de correlação espacial das aberturas.

As distribuições de probabilidade contínuas do tipo normal (Matsuki *et al.*, 2006; Vickers *et al.*, 1992; Yeo *et al.*, 1998; Schmittbuhl *et al.*, 2008; Neuville *et al.*, 2012; Oron e Berkowitz, 1998) e lognormal (Figura 10) (Moreno e Tsang, 1994; Zimmerman e Bodvarsson, 1996; Pyrak-Nolte *et al.*, 1997; Keller, 1998; Wendland e Himmelsbach, 2002; Zheng *et al.*, 2008; Nowamooz *et al.*, 2013; Wang e Cardenas, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015) têm sido as mais adequadas nos trabalhos científicos.

A abertura da fratura é uma variável regionalizada, isto é, para cada coordenada no espaço, há pontos amostrais (aleatórios) que podem ser medidos usando técnicas físicas e/ou inferidos (estimados) usando funções matemáticas. A variação espacial da abertura pressupõe que cada valor no espaço está relacionado, de algum modo, com valores obtidos a partir de valores situados a uma certa distância. Isso significa que

valores de abertura mais próximos do ponto a ser estimado, possuem maior influência na estimativa. A distância que caracteriza a continuidade espacial entre dois pontos é chamada de correlação espacial (conceito da área de geoestatística). Fraturas com mesma distribuição de probabilidade de aberturas podem ter diferente correlação espacial.

Figura 10 – Distribuição de frequência logarítmica para valores de abertura em uma amostra indeformada fraturada (área = 142 m²) da região de Trans-Pecos, Texas, EUA.

Fonte: Adaptado de Wang e Cardenas (2014).

A geoestatística baseia-se na variabilidade espacial (e aleatória) de um fenômeno ou atributo (Matheron, 1967). Na geoestatística, a covariância mede a relação entre valores da mesma variável, obtidos em pontos separados por uma distância h , conforme uma determinada direção. Isso significa que, ao alterar a direção, a covariância também pode se alterar e nesse caso, há indicação de presença de fenômeno espacial anisotrópico (Yamamoto e Landim, 2013). A modelagem de uma função de correlação espacial, denominada variograma, é frequentemente utilizada para a solução de problemas de estimativa de atributos espaciais.

Caracterizar uma função de correlação espacial (aleatória) corresponde a caracterizar o comportamento de todas as variáveis aleatórias, isto é, cada variável aleatória individual é caracterizada por sua função de distribuição univariada. Da mesma maneira, cada par de variáveis (de um mesmo atributo ou fenômeno) na localização u_1 e

u_2 é caracterizada pela de distribuição bivariada; cada tríplce de variáveis aleatórias (nas localizações u_1 , u_2 e u_3) é caracterizada pela função de distribuição trivariada e assim em diante. As três simplificações mais importantes para caracterizar uma função de correlação espacial são:

- A média é estacionária, isto é, o valor esperado de todas as variáveis aleatórias é constante:

$$E\{Z(u)\} = m, \forall u \in D$$

Equação 2

Onde, $E\{\}$ é o operador valor esperado, m é o valor médio constante de todas as variáveis aleatórias, e D é o domínio de interesse.

- Estacionaridade da covariância, isto é, a covariância entre duas variáveis aleatórias depende apenas do vetor de separação, h , mas não das suas posições absolutas:

$$C(Z(u_1), Z(u_2)) = E\{Z(u_1) Z(u_2)\} - E\{Z(u_1)\} E\{Z(u_2)\} = C(h)$$

Equação 3

Onde, $C()$ é o operador covariância, e $h = u_1 - u_2$ é o vetor de separação. A estacionaridade da média implica estacionaridade da variância, isto é, a variância é constante (σ^2) para todas as variáveis aleatórias:

$$\text{Var}(Z(u)) = C(Z(u), Z(u)) = \sigma^2, \forall u \in D$$

Equação 4

- Ergodicidade, isto é, a média e a variância de uma única realização obtida a partir da função de correlação espacial é igual à média e a variância de todas as outras possíveis realizações do processo estocástico. Dessa maneira, o modelo de probabilidade do conjunto de possíveis realizações da variável aleatória pode ser inferido a partir do conjunto de dados experimentais.

$$E\{Z(u) Z(u + h) - m^2\} = C(h)$$

Equação 5

Para alguns atributos, como a abertura da fratura, não é apropriado o uso da função de correlação com uma variância estacionária, principalmente quando o grau de variabilidade global aumenta com o tamanho da área de estudo (ou da amostra). Neste caso, a estacionaridade na covariância pode ser flexibilizada à estacionaridade da variância dos incrementos $[Z(u+h)-Z(u)]$. A função variograma é definida como:

$$\text{Var}(Z(u_1) - Z(u_2)) = E\{[Z(u_1) - Z(u_2)]^2\} = 2\gamma(h), \forall u_1, u_2 \in D$$

$$2\gamma(h) = E\{[Z(u+h) - Z(u)]^2\}$$

Equação 6

A estimativa da função $2\gamma(h)$ pode ser feita considerando n pares de pontos para uma determinada distância, h , chamada de momento de inércia (Journel, 1989):

$$2\gamma(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z(u+h) - Z(u)]^2$$

Equação 7

Com relação ao termo variograma, há uma confusão terminológica na literatura. Alguns autores preferem o termo variograma, como Wackernagel (2003), por exemplo; outros, a denominação semivariograma, por exemplo Journel e Huijbregts (1978). A confusão a respeito do prefixo *semi* surgiu porque Matheron (1965) tinha em mente a variância dos incrementos $[Z(u+h)-Z(u)]$, mas o valor desejado, na prática, era a metade dessa diferença, que fornece a variância da diferença de pares de pontos separados por h (Yamamoto e Landim, 2013). Dessa maneira, o termo $2\gamma(h)$ é chamado de variograma e $\gamma(h)$, de semivariograma.

A função variograma tende (mas nem sempre) a oscilar em torno de um valor máximo de variância, apesar do aumento da distância (Figura 11); esse ponto é chamado de patamar ou soleira. O alcance ou amplitude é a distância em que $2\gamma(h)$ atinge o patamar. O chamado efeito pepita ocorre devido à variância aleatória do fenômeno ou por causa da escala de amostragem.

Figura 11 – Características de um variograma. Fonte: Adaptado de Chiverton *et al.* (2015).

Quanto maior a dispersão, maior o momento de inércia e menor a correlação. Caso não haja dispersão, o momento de inércia é zero e o coeficiente de correlação igual a 1 (correlação máxima). A covariância entre os pontos diminui e a variância aumenta à medida que Δh aumenta, porque ocorre a maior interdependência entre os pontos a distâncias progressivamente maiores. Se o vetor h for mínimo (tendendo a zero), a variância será mínima e a covariância, máxima (Yamamoto e Landim, 2013).

A determinação do comprimento de correlação espacial é feita a partir do ajuste de algum modelo teórico de variograma (Figura 12) sobre o variograma experimental (gerado a partir de valores amostrais). Os modelos teóricos mais utilizados para determinação do comprimento de correlação espacial da abertura de fraturas têm sido o exponencial (Hakami e Larsson, 1996; Wendland e Himmelsbach, 2002; Wang e Cardenas, 2014), o gaussiano (Neuweiler *et al.*, 2004; Liu e Neretnieks, 2006) e o esférico (Vickers *et al.*, 1992). Os variogramas experimentais construídos com base na correlação espacial apenas entre dois pontos separados por um vetor de distância.

A descrição realística completa de meios heterogêneos complexos pode não ser obtida apenas com o variograma (Koltermann e Gorelick, 1996), resultando na ausência ou pouca presença de dependência espacial do parâmetro (como a abertura da fratura). Caminhos preferenciais de maior condutividade hidráulica (Figura 9), os quais permitem o transporte de solutos em pequenas regiões da fratura com velocidade acima velocidade

média podem não ser bem caracterizados apenas com o uso variograma (Wen e Gómez-Hernández, 1998).

Figura 12 – Função variograma (teórica) do tipo gaussiano, exponencial, esférico e potência.

Fonte: Adaptado de Gómez-Hernández (2005).

A caracterização da estrutura espacial fornecida pela função de correlação espacial não deve ser o objetivo final da análise espacial. A função de correlação espacial (variograma, por exemplo) pode ser usada para estimar valores do atributo em pontos não amostrados usando técnicas de interpolação, como a krigagem (simples e ordinária) e a cokrigagem (Isaaks e Srivastava, 1989. No entanto, a krigagem envolve a suavização (subestimar valores altos e superestimar valores baixos) das dispersões reais (Journel e Huijbregts, 1978). O efeito da suavização obtido, por exemplo, pelas técnicas de krigagem e cokrigagem, não reproduz adequadamente as características da amostra usada para fazer as estimativas em pontos não amostrados (Yamamoto e Landim, 2013).

A simulação estocástica é uma alternativa à interpolação por krigagem. O propósito da simulação estocástica é amostrar realizações da distribuição espacial do atributo de maneira consistente com os dados amostrais disponíveis, mantendo suas propriedades estatísticas (Gómez-Hernández, 2005). Cada realização deve apresentar

média e variância iguais aos dados amostrais. O termo estocástico significa que há mais de uma possibilidade de valor a ser considerado para o atributo em questão. Essa abordagem é diferente da determinística, a qual não considera inúmeras possíveis possibilidades (ou realizações) para o atributo a partir de uma amostra (Figura 13). Uma das vantagens da simulação estocástica é honrar um nível realístico de heterogeneidade da área de estudo (Furuie, 2009). Modelos estocásticos oferecem possibilidades de ocorrência de vários cenários (pessimistas e otimistas), permitindo uma análise de incertezas (Srivastava, 1994).

Figura 13 – Duas realizações obtidas para o atributo transmissividade (m^2/dia) do aquífero (arenito) usando a simulação estocástica sequencial. Os maiores e os menores valores de transmissividade estão indicados, respectivamente, pelas cores vermelho e azul.

Fonte: Arquivo do autor.

O algoritmo mais simples para gerar realização a partir de uma função de distribuição multivariada é a simulação sequencial (Gómez-Hernández e Srivastava, 1990; Gómez-Hernández e Journel, 1993; Gómez-Hernández e Cassiraga, 1994; Deutsch e Journel, 1998). A simulação sequencial é baseada na aplicação repetitiva da definição de probabilidade condicional a uma distribuição multivariada (Gómez-Hernández, 2005). A simulação sequencial gaussiana (SSG) é um tipo de simulação sequencial que gera realizações utilizando funções aleatórias normais multivariadas. A SSG reproduz as propriedades da distribuição multivariada gaussiana da população amostral em cada realização por meio de distribuições condicionantes (Caers, 2000 apud Furuie, 2009). As distribuições condicionantes são funções que descrevem a distribuição de probabilidade de uma variável aleatória. Mettler *et al.* (2006) utilizaram a simulação sequencial para geração de 50 realizações de distribuição de aberturas, com o objetivo de estudar a

influência da variação da abertura sob o transporte de contaminantes em fraturas dos Alpes Suíços (*Grimsel*).

2.4.2 Abertura variável: simulação estocástica fractal

Nos últimos 15 anos, os estudos de propriedades de escalonamento (*scaling*) de sistemas de fraturas têm ganhado destaque, e funções matemáticas do tipo lei de potências e a teoria fractal têm sido utilizadas para esse propósito (Berkowitz, 2002). Um fractal é um objeto que apresenta invariância na sua forma à medida em que a escala, sob a qual o mesmo é analisado, é alterada, mantendo-se a sua estrutura idêntica à original (Figura 14). A dimensão fractal, D_f , é o parâmetro que caracteriza quantitativamente os fractais.

A dimensão fractal não é inteira e excede a dimensão topológica ($D_f < I_m$, sendo I_m a dimensão do espaço Euclidiano o qual está imerso). Um objeto de dimensão, D_f , sempre estará imerso em um espaço de dimensão mínima $I_m = d + 1$, podendo apresentar um excesso de extensão sobre a dimensão, d , ou uma falta de extensão ou falhas em uma dimensão $d+1$. Por exemplo, para uma trinca cuja dimensão fractal está no intervalo $1 \leq D_f \leq 2$ a dimensão de imersão é a dimensão $I_m = 2$. Um fractal linear é um fractal imerso numa dimensão euclidiana $I_m = d+1 = 2$, com projeção em $d=1$ é caracterizado por picos e vales (Figura 14). Wendland e Himmelsbach (2002) utilizaram $D_f = 2,32$ para a fratura de um bloco de arenito.

As paredes da fratura são irregulares e possuem propriedades fractais autoafins (Brown e Scholz, 1985; Schmittbuhl *et al.*, 1995; Bonnet *et al.*, 2001; Gouze *et al.*, 2005; Schmittbuhl *et al.*, 2008), em que a variância e a correlação espacial aumentam com o tamanho da fratura (Neuman, 2005). A descrição das rugosidades da fratura usando fractais (Figura 15) tem recebido a atenção dos pesquisadores das áreas de geologia, geofísica, física, matemática aplicada e engenharia. A geometria fractal é apropriada para descrição de objetos que exibem invariância na sua forma à medida em que a escala (sob a qual o mesmo é analisado) é alterada (*scaling*), mantendo a sua estrutura idêntica à original. Ao representar a superfície da parede da fratura usando a geometria fractal (autoafinidade) significa que a distribuição espacial das rugosidades locais é estatisticamente invariante sob a seguinte transformação de escala:

$$X \rightarrow \tau \cdot X$$

$$y \rightarrow \tau \cdot y$$

$$z \rightarrow \tau^{\xi} \cdot z$$

Equação 8

Onde, τ é um fator de escala e ξ é o denominado expoente de rugosidade (ou de Hurst).

A transformação de escala apresentada na Equação 8 é isotrópica dentro do plano médio da fratura (x,y ; Figura 8), desde que os fatores de escala sejam os mesmos ao longo das direções dos eixos x e y . Por outro lado, a transformação de escala é anisotrópica na direção z , fora plano x,y da fratura. Para a direção z , o expoente de rugosidade descreve a anisotropia. Quando o expoente de rugosidade é diferente do valor 1 (usualmente está entre 0 e 1), a transformação de escala é anisotrópica e a superfície tem o comportamento de um fractal autoafim.

Figura 14 – Perfil unidimensional da superfície de uma fratura. As linhas em vermelho indicam a característica de invariância da rugosidade da fratura. Fonte: Candela *et al.* (2009).

Bonnet *et al.* (2001) apresentaram uma revisão detalhada dos métodos disponíveis para determinar os expoentes da função tipo lei de potências e o número da dimensão fractal. De acordo com Berkowitz (2002), os valores de expoentes de leis de potência e dimensão fractal variam amplamente. Por outro lado, diversos estudos (Bouchaud *et al.*,

1990; Schmittbuhl *et al.*, 1995; Gouze *et al.*, 2003; Neuville *et al.*, 2012) têm sugerido que a aplicação da lei de potência para a superfície rugosa de uma fratura autoafim apresenta um valor “universal” do expoente de Hurst entre 0,75 e 0,80.

O valor do expoente de Hurst reportado para materiais como o cimento e o granito é $\xi=0,8$ (Brown, 1989; Måløy *et al.*, 1992; Poon *et al.*, 1992; Auradou *et al.*, 2005; Matsuki *et al.*, 2006) e $\xi=0,5$ para arenitos (Boffa *et al.*, 1998; Ponson *et al.*, 2007). No entanto, a estimativa $0,75 < \xi \leq 0,8$, também foi reportada para arenitos (Nasseri *et al.*, 2006). Para a superfície interna das fraturas de rochas, a estimativa $0 < \xi \leq 0,85$ foi obtida por Vickers *et al.* (1992), Cox e Wang (1993), Johns *et al.* (1993), e Odling (1994). O expoente de Hurst está diretamente relacionado com um parâmetro chamado dimensão fractal na forma $D = 2 - \xi$.

Figura 15 – Superfície rugosa de uma fratura gerada a partir da teoria fractal. A dimensão fractal usada foi igual a 2,5. Fonte: Brown (1987).

2.4.3 Abertura constante

Antes de 1980 os pesquisadores da área de escoamento e transporte em meios fraturados descreveram a geometria de uma fratura individual como um par de placas planas paralelas com abertura constante (Snow, 1965) (Figura 16). De acordo com Zheng *et al.* (2008) e Hjerne e Nordqvist (2014), apesar dessa descrição ser inadequada para estudos de transporte de contaminantes, alguns pesquisadores ainda argumentam que é conveniente representar o campo de abertura em termos de uma “abertura equivalente”. Várias definições de “abertura equivalente” na literatura causaram confusão até Tsang

(1992) revisá-las e categorizar três tipos básicos de “abertura equivalente”. Tsang (1992) descreveu a abertura de balanço de massa (b_m), a abertura cúbica (ou hidráulica) (b_c) e a abertura de perda por atrito (b_l), as quais seguem, tipicamente, a relação:

$$b_m \geq b_c \geq b_l$$

Equação 9

Isto é, a abertura de balanço de massa é maior em relação à abertura cúbica, a qual é maior que a abertura de perda por atrito.

A abertura em uma única fratura é a medida da separação das paredes da fratura. A abertura de balanço de massa e a abertura cúbica correspondem, respectivamente, a média aritmética e geométrica do campo de abertura (Tsang, 1992). Zheng *et al.* (2008) mostraram por meio de experimentos que a abertura de balanço de massa deve ser usada, em detrimento dos outros dois tipos de aberturas, para descrever o transporte de traçador em uma única fratura com abertura variável.

A abertura de perda por atrito e a abertura cúbica pressupõem que a queda de pressão ocorre por causa do escoamento em regime laminar através da fratura. A queda de pressão é muito sensível às heterogeneidades locais, especialmente para escoamento radial convergente e divergente. As pequenas aberturas oferecem maior resistência ao escoamento e causam maior perda de carga (Tsang, 1992). Entre os três tipos de “abertura equivalente”, talvez a abertura por balanço de massa seja a mais digna para ser chamada de “abertura equivalente”, pois representa uma média das aberturas ao longo do escoamento; essa média é representada pelo tempo médio de residência de um traçador dentro da fratura. No entanto, essa “abertura equivalente” trabalha com a hipótese de que a vazão é linear e não radial.

Moreno *et al.* (1988) concluíram que o tempo médio de residência do traçador (empregado no cálculo da abertura de balanço de massa) foi compatível com o tempo do traçador apresentado na curva de passagem (*breakthrough curve*), obtida a partir de simulações numéricas (*particle-tracking simulations*). Hjerne e Nordqvist (2014) encontraram uma relação empírica entre a abertura de balanço de massa e a transmissividade, a partir de testes hidráulicos em 74 poços no embasamento cristalino da Suécia. Exemplos de aplicação da abertura hidráulica (ou cúbica) equivalente em estudos sobre transporte de colóides e vírus em fraturas podem ser encontrados em Zvikelsky e Weisbrod (2006) e Weisbrod *et al.* (2013).

Figura 16 – Representação da vazão (Q) entre placas planas paralelas com abertura constante (b); altura da placa (H) e comprimento (W) Fonte: Klimczak *et al.* (2010)

As dificuldades para definição de abertura, $b(x,y)$ (Figura 8), são maiores para fraturas de rochas calcárias, por onde podem escoar fluidos ricos em CO_2 . Nesse caso, a dissolução química (ou erosão) pode alterar drasticamente a superfície topográfica das paredes da fratura (Gouze *et al.*, 2003) (Figura 17). A formação geológica *karst* é, certamente, o exemplo mais notável de alteração das propriedades de escoamento e transporte ao longo de um período de tempo relativamente curto (Noiriel *et al.*, 2013).

Quando há o fenômeno da dissolução, a validade da lei cúbica (Snow, 1965) que relaciona a permeabilidade da fratura com o quadrado da abertura torna-se questionável e, como consequência, o modelo de placas planas paralelas passa a ser inadequado para a simulação computacional de transporte de contaminantes (Gouze *et al.*, 2003). Por outro lado, há estágios de dissolução em as alterações da abertura média não ocasionam diferenças significativas no escoamento em comparação com o modelo de placas planas paralelas (Noiriel *et al.*, 2013). Isso ocorre porque o coeficiente de variação do campo de abertura é reduzido em comparação com os primeiros estágios temporais de dissolução (Figura 18).

Figura 17 – Representação esquemática das alterações na abertura de uma fratura por causa da dissolução química: (a) é o primeiro estágio temporal de dissolução e (b) é um segundo estágio de dissolução. A linha tracejada indica o critério para definição de uma abertura média, $\langle b \rangle$. Deve-se ressaltar que o fluido não necessariamente irá escoar dentro da baixa delimitada por $\langle b \rangle$. Fonte: Adaptado de Noiriel *et al.* (2013).

Figura 18 – Distribuição da abertura média (linha contínua) e comparação com a distribuição de probabilidade normal (linha tracejada) em diferentes estágios temporais (t) de um experimento de dissolução uma única fratura. Fonte: Adaptado de Noiriel *et al.* (2013).

2.5 Técnicas de medição da geometria da fratura

2.5.1 Superfície topográfica, injeção de resina e molde de resina

Para estimativa do campo de abertura, é necessária a medição (em escala adequada) das rugosidades presentes na superfície das paredes da fratura. As primeiras técnicas usadas para medição da rugosidade da fratura foram (Figura 19): a medição da superfície topografia das paredes (inferior e superior) da fratura; a injeção de resina epóxi dentro da fratura até que o espaço vazio seja preenchido. A amostra contendo a fratura era cortada em fatias e a abertura era medida por meio da espessura da resina ao longo das intersecções da fratura em cada fatia; e construção de réplicas das superfícies topográficas das fraturas.

Figura 19 – Três técnicas para medição da geometria da fratura. Fonte: Hakami *et al.* (1995).

A medição da superfície topográfica é uma técnica que foi usada no passado por Gentier (1989), em que as paredes da fratura eram medidas usando um perfilômetro mecânico. Os perfilômetros mecânicos medem o deslocamento relativo de uma agulha em contato com a superfície da amostra (veja detalhes sobre essa técnica em Durham e Bonner, 1993). Diversos pesquisadores (Schmittbuhl *et al.*, 2008; Giwelli *et al.*, 2009;

Ameli *et al.*, 2013) têm substituído o uso dos perfilômetros mecânicos por perfilômetros ópticos, porque não requerem contato físico com a superfície da amostra e possuem tempos de aquisição mais rápidos. Os perfilômetros ópticos disponíveis trabalham com uma resolução espacial micrométrica da superfície de elevação ao longo de amostras na escala de centímetros até o metro.

Uma das dificuldades da aplicação dos perfilômetros ópticos é que alguns perfilômetros ópticos conseguem trabalhar apenas em superfícies feitas por um material opticamente homogêneo. Schmittbuhl *et al.* (2008) utilizaram a técnica de molde de resina (Figura 19; técnica III) (silicone azul, RTV 1570) em uma fratura de granito. Em seguida, a superfície topografia do molde de resina foi mapeada usando a técnica de perfilometria óptica. O produto final obtido, foi um mapa digital (16 milhões de pixels para uma área de 95,97 mm²) da parede da fratura com resolução horizontal e vertical iguais a 24 e 2 microns, respectivamente.

A técnica de injeção de resinas epóxi dentro da fratura (Figura 19, técnica II) é descrita por Gale *et al.* (1987). O molde da fratura (resina após o tempo de cura) era examinado usando um microscópio acoplado a uma câmera fotográfica. A acurácia desse tipo de medida era de aproximadamente 0,01 mm. Hakami (1993) utilizou essa técnica, injetando um tipo de argamassa em uma fratura *in-situ*. As amostras foram retiradas a partir da perfuração de furos paralelos ao plano da fratura e cortadas em das fatias. A espessura da resina foi medida por meio de fotografias ao longo do perfil da fratura nas duas fatias (Figura 20).

Figura 20 – Fotografia digital do molde usando um microscópio acoplado a uma câmera. A imagem digital apresenta a fratura com 4 mm de comprimento. O tamanho das linhas internas (cor preta) indica a medida de abertura ao longo do comprimento da fratura.

Fonte: Adaptado de Hakami *et al.* (1995).

A técnica de injeção de resinas foi aprimorada usando resinas epóxi fluorescentes, técnicas físicas de óptica e métodos de processamento digital de imagens. Ameli *et al.* (2013) preencheram com resina epóxi a fratura de uma amostra e cortaram a mesma em uma série de seções para realizar a tomada de imagens da espessura da abertura (Figura 21). Antes de injetar a resina, esses autores impuseram um espaço de 900 microns entre as paredes da fratura para que não houvesse regiões de abertura igual a zero (contato entre as paredes). Dessa maneira, foi garantido o escoamento da resina ao longo do comprimento da fratura.

A aplicação da técnica de moldes de resina (Figura 19; técnica III) tem sido feita de acordo com o método descrito por Isakov *et al.* (2001). Nesse método, cada metade da fratura original deve ser limpada com ar comprimido e colocadas em uma forma funda, com face da fratura voltada para cima. A forma deve ser preenchida com uma resina de baixa viscosidade e contração desprezível (Dow Corning Silastic® E RTV, por exemplo). A característica dessa resina deve permitir sua remoção sem danos à superfície rugosa. Após a cura da resina, deve-se polir todas as superfícies, com exceção da superfície rugosa. A superfície rugosa resultante deve ficar em uma placa lisa (de acrílico, por exemplo), a qual representa a matriz rochosa (impermeável).

Figura 21 – Exemplo de uma fatia de fratura (material de concreto) preenchida com resina epóxi (técnica de injeção de resina). O perfil em azul é a delimitação da resina epóxi e o gráfico de linhas representa os valores de abertura em função da espessura da resina.

Fonte: Adaptado de Ameli *et al.* (2013).

A determinação dos valores de abertura também pode ser feita por meio da injeção de um traçador (corante) dentro do plano da fratura. Uma câmera (*Charge*

Coupled Device, CCD) é posicionada acima da placa e a fonte de luz (de intensidade constante e feixe monocromático) deve iluminar a fratura. As imagens obtidas em cada ponto do plano (x,y) da fratura podem ser processadas e com base na lei de Lambert-Beer, então, estimar a concentração no plano (x,y) da fratura (Detwiler *et al.*, 1999; Isakov *et al.*, 2001; Detwiler, 2010; Nowamooz *et al.*, 2013):

$$I(x,y) = I_0(x,y)\exp(-\epsilon C(x,y)b(x,y))$$

Equação 10

Onde, I e I_0 são, respectivamente, a intensidade de luz para uma dada concentração C , a intensidade de luz para C igual a zero, ϵ é a absorção do traçador. As absorbâncias $(-\ln(\frac{I}{I_0}))$ são diretamente proporcionais à concentração do traçador, que por sua vez são proporcionais à espessura da camada de traçador, a qual é proporcional às aberturas da fratura. Os valores de absorbância podem ser convertidos em valores de concentração por meio de uma relação linear crescente.

2.5.2 Microtomografia computadorizada de raios-X

A ideia de observar o interior de objetivos opacos sem a necessidade de executar cortes ou dessecamento era considerada impossível um século atrás. No entanto, devido as descobertas inovadoras da radiação ionizante por Wihelm Rontgen, Henri Becquerel e Pierre e Marie Currie e o desenvolvimento matemático teórico por Johann Radon, e muitos outros cientistas, foi possível a criação do primeiro tomógrafo comercial em 1972 (Hounsfield, 1978 apud Vaz *et al.*, 2014).

A microtomografia computadorizada de raios-X (micro-CT) é uma excelente técnica não-invasiva para analisar a estrutura interna de materiais opacos (Ketcham e Carlson, 2001; Polak *et al.*, 2004; Karpyn *et al.*, 2007; Zhu *et al.*, 2007) e para a caracterização e quantificação de processos físicos (como o escoamento de água) em meios porosos e meios fraturados (Keller *et al.*, 1999; Montemagno e Pyrak-Nolte, 1999; Bertels *et al.*, 2001; Watanabe *et al.*, 2011). A micro-CT é definida como uma imagem tomográfica em uma resolução espacial superior a 50 microns (Stock, 2008). A aplicabilidade dos tomógrafos médicos convencionais em materiais porosos naturais (solos e rochas) é restrita por causa da limitada resolução espacial de aproximadamente

200 microns (Udawatta e Anderson, 2008) e da natureza policromática dos raios-X empregados (Vaz *et al.*, 2011).

A micro-CT utiliza raios-X que penetram no objeto para relevar detalhes do seu interior por meio de uma imagem digital, usualmente chamada de fatia (Figura 22). Cada fatia da micro-CT representa uma certa espessura do objeto a ser analisado e, por isso, cada fatia é uma composição de voxels (*volume elements*). O valor associado a cada voxel é chamado de número CT (*CT-number*). Uma típica imagem digital fotográfica é composta por pixels (*picture elements*). A imagem de micro-CT apresenta cores em níveis de cinza que correspondem à atenuação dos raios-X. Materiais mais e menos atenuantes são representados na imagem por níveis de cinza mais claros e mais escuros, respectivamente. Essa atenuação ocorre de acordo com a proporção de raios-X dispersados ou absorvidos à medida que eles atravessam cada voxel (Kyle e Ketcham, 2015). A atenuação dos raios-X é uma função da energia desses raios e da densidade e do número atômico do objetivo a ser analisado (Ketcham e Iturrino, 2005). Quanto maior a energia de cada fóton dos raios-X, menor é seu comprimento de onda e menor é a atenuação pelo material.

Figura 22 – Fatia (2D) de uma amostra cilíndrica de basalto (não fraturado) obtida por meio da técnica micro-CT. Os minerais mais atenuantes são representados pela cor branca, enquanto os menos atenuantes são mostrados em cor escura. Fonte: Arquivo do autor.

Os componentes básicos de um sistema de micro-CT são (Favretto, 2009): a fonte de raios-X, tamanho do ponto focal, sistema de detecção e o sistema de posicionamento do objeto (ou amostra). O sistema de micro-CT baseia-se na aquisição de múltiplas vistas ou projeções de um objeto sobre uma série de orientações angulares. Os sistemas mais modernos de micro-CT utilizam a configuração feixes cônicos (*cone-beam*), a qual os raios-X se originam a partir de um pequeno ponto focal e iluminam um grande detector planar, enquanto o objetivo fica posicionado em um suporte de rotação (Figura 23).

Figura 23 – Representação esquemática de um sistema de microtomografia computadorizada de raios-X. Fonte: Adaptado de Kyle e Ketcham (2015).

Cada imagem de micro-CT é criada direcionando os raios-X através do objeto a partir de múltiplas orientações e medindo a atenuação desses raios. O algoritmo conhecido como *filtered back-projection* (FBP) (Kak e Slaney, 1987) é utilizado para reconstrução da distribuição de atenuação dos raios-X em uma série de planos fatiados (Kyle e Ketcham, 2015). Na projeção *cone-beam* o algoritmo FDK (Feldkamp *et al.*, 1984), mais intensivo computacionalmente, é frequentemente empregado para reconstrução da imagem. A justaposição das fatias (empilhamento de imagens fatiadas) a partir de técnicas de processamento digital de imagens permite descrever a geometria tridimensional do objeto a ser escaneado (Figura 24).

Uma das dificuldades da técnica de micro-CT é a presença de artefatos (*artifacts*) que dificultam a interpretação de detalhes de interesse nas imagens. Entre os tipos de

artefatos, o *Beam-hardening* é o que mais ocorre em imagens de micro-CT (Kyle e Ketcham, 2015). Esse artefato ocasiona variações do *CT-number* para um mesmo material presente no objeto a ser escaneado, dependendo de sua posição espacial (Ketcham *et al.*, 2010). Artefatos *Beam-hardening* ocorrem com maior frequência em sistema de micro-CT com baixa energia de raios-X usados para escanear objetos densos (Bertels *et al.*, 2001). Outro tipo de artefato que pode ocorrer nas imagens de micro-CT é o tipo anel (*ring artifact*). O artefato anel normalmente aparece em forma de círculos centrados sob um eixo de rotação e é causado por mudanças de elementos individuais (por um conjunto de elementos) na saída do detector, fazendo com que raios correspondentes em cada vista tenham valores anormais em comparação com os seus vizinhos (Kyle e Ketcham, 2015). Uma boa revisão sobre as causas desses artefatos e sobre técnicas para correção pode ser encontrada em Hasan *et al.* (2010).

Figura 24 – (a) Representação tridimensional obtida pela técnica de micro-CT de um objeto fraturado, após a aplicação de técnicas de processamento digital e imagem; (b) Representação tridimensional das fraturas mostradas em (a). Fonte: Voorn *et al.* (2013).

A desvantagem da técnica de micro-CT está na limitação do tamanho dos objetivos a serem escaneados. Os microtomógrafos de bancada de tubos de raios-X de tungstênio que operam com uma tensão de 100 keV e corrente elétrica de 100 microA permitem o escaneamento de amostras com até 7,0 cm de altura por 5,0 cm de largura (materiais pouco atenuantes). Rochas basálticas, por exemplo, possuem minerais que atenuam muito a radiação (como os óxidos de ferro e silicatos), por isso, esse limite de tamanho do objeto a ser escaneado é menor. Microtomógrafos de alta resolução (HRXCT)

utilizam fontes microfocais com pontos focais entre 10 e 50 microns e energias de pico entre 120 e 250 KeV (por exemplo, o *High-Resolution X-ray CT Facility* na Universidade do Texas, Austin, EUA; Ketcham e Iturrino, 2005), podem escanear com boa resolução (<30 microns) objetos de até 8,0 cm de altura/diâmetro por 15,0 cm de altura.

2.6 Escoamento de fluidos em uma única fratura

Na maioria dos estudos sobre processos hidrodinâmicos em meios porosos e meios fraturados saturados é assumido que o escoamento pode ser descrito pela Lei de Darcy, a qual representa a relação linear entre o gradiente hidráulico e a taxa de escoamento volumétrico. Conforme a vazão aumenta, a relação entre a velocidade de Darcy, q , e o gradiente hidráulico é desviada da linearidade e o escoamento torna-se não Darciano (Bear, 1979). Ing e Xiaoyan (2002) mostraram como o escoamento não Darciano tem um impacto significativo na área geotécnica. Basak e Rajagopalan (1982) mostraram que o comprimento da intrusão salina aumenta quando o escoamento é desviado em relação à Lei de Darcy. A avaliação de risco à contaminação baseada na aplicabilidade da Lei de Darcy é, às vezes, inapropriada para aquíferos fraturados, devido a possível ocorrência de regime de escoamento não-laminar (Zimmerman *et al.*, 2004; Cherubini *et al.*, 2012).

Segundo Zimmerman *et al.* (2004), a Lei de Darcy é válida para um certo intervalo do número de Reynolds ($Re \leq 10$) em que as forças inerciais existem, porém, as forças viscosas são predominantes no escoamento. No caso de elevados números de Reynolds ($Re \geq 10$), a relação linear entre q e o gradiente hidráulico é alterada pelo regime inercial (cinético) e pode ser descrita pela equação de Forchheimer. Outros estudos em meios fraturados (Boutt *et al.*, 2006; Cardenas *et al.*, 2007) têm mostrado que zonas de recirculação podem ocorrer para $Re < 1$, indicando que a não linearidade pode existir mesmo para $Re < 1$.

O escoamento através de uma fratura pode ser completamente descrito pelas equações de Navier-Stokes (N-S) (Zimmerman e Bodvarsson, 1996). Porém, o termo inercial das equações de N-S, responsável pelas não linearidades do escoamento, torna muito difícil a solução desta equação. Por causa dessa dificuldade em resolver o termo inercial das equações de N-S, simplificações têm sido frequentemente feitas, levando ao uso da chamada equação de Stokes e da equação de Reynolds para $Re < 1$ (ou lei cúbica local) (Oron e Berkowitz, 1998). Por causa da sua simplicidade, a lei cúbica local tem

sido muito usada para quantificar o escoamento de água através de fraturas (Brown, 1987; Giacomini, 2008; Schmittbuhl *et al.*, 2008; Noiriel *et al.*, 2013).

2.7 Transporte de solutos em uma única fratura

Além das informações geométricas das fraturas, é necessário o conhecimento dos parâmetros de transporte de solutos. A heterogeneidade da abertura resulta em uma distribuição heterogênea de velocidades do fluido. Como consequência, o fenômeno de dispersão hidromecânica (Bear, 1979) irá depender do campo de velocidades do fluido (Bodin *et al.*, 2003). Os fenômenos físicos que usualmente atuam no transporte do soluto em uma fratura são uma consequência da:

- Advecção do soluto devido à velocidade média do fluido no plano da fratura;
- Dispersão hidrodinâmica decorrente das variações de velocidades instantâneas do fluido em relação à velocidade média;
- Difusão do soluto por diferenças de concentração na fratura e na rocha matriz;
- Reações físico-químicas entre o soluto e a fase sólida do material na rocha matriz e nas paredes da fratura.

Devido à falta de valores medidos dos parâmetros de transporte, testes com traçadores têm sido frequentemente empregados (Ptak *et al.*, 2004). Os testes com traçadores fornecem informações relativas à direção e velocidade de escoamento da água, assim como a concentração do contaminante que pode ser transportado. O uso de traçadores pode auxiliar na determinação da condutividade hidráulica, porosidade e dispersividade (Nowamooz *et al.*, 2013; Bodin *et al.*, 2013). A avaliação de resultados provenientes das injeções de traçadores em pulso dentro de fraturas é usualmente feita pelo histórico de concentração (Figura 25), chamada de curva de passagem (*breakthrough curve*) em um ponto de controle.

O transporte não reativo (passivo) de solutos através do meio poroso tem sido tradicionalmente descrito pela Equação de Advecção-Dispersão (Advection–Dispersion Equation ADE), baseada em uma analogia à Lei de Fick da difusão (Bear, 1979). De acordo com a natureza da advecção, o transporte de soluto é controlado pela velocidade do fluido. Por isso, a modelagem do transporte de soluto necessita de uma caracterização precisa e acurada do campo de velocidades do escoamento dentro da fratura (Bodin *et al.*, 2003).

Figura 25 – Curvas de passagem normalizadas (concentração, C e massa, M) e curva de recuperação (ROB) para os solutos injetados (piranina e cádmio) em uma fratura de arenito.

Fonte: Adaptado de Wendland e Himmelsbach (2002).

Os experimentos laboratoriais e de campo com traçadores em fraturas têm apresentado curvas de passagem com picos de concentração em um curto período e longas caudas (*tailing*) de baixa concentração (Becker e Shapiro, 2000; Wang e Cardenas, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015). Diversos pesquisadores têm mostrado que a ADE não é adequada para ajustar curvas de passagem com picos de concentração em um curto período e longas caudas. Essa característica das *breakthrough curves* é chamada de transporte “anômalo”. De acordo com Becker e Shapiro (2000), a explicação mais frequente para o transporte anômalo é a de que enquanto o traçador se move rapidamente através de canais preferenciais (efeito *channeling*), uma fração significativa desse traçador se move lentamente, por efeito difusivo, entre a matriz rochosa e a fratura (Figura 26).

No escoamento em canais preferenciais, a massa de traçador sujeita ao efeito de canais (maior velocidade) resulta em um pico de concentração na curva, enquanto a massa de traçador que é submetida ao efeito de difusão (menor velocidade) resulta em uma cauda (na curva) de baixa concentração por um período longo de tempo (Tang *et al.*, 1981; Maloszewski e Zuber, 1993; Sanford *et al.*, 1996). Outros autores têm proposto modelos matemáticos, nos quais a massa é transportada, por advecção ou difusão, de uma

região com maior velocidade para regiões de estagnação de fluido (Haggerty e Gorelick, 1995; Berkowitz *et al.*, 2008).

Figura 26 – Representação esquemática mostrando: (a) transporte advectivo em uma rede de fraturas sem o efeito da difusão através da matriz rochosa; (b) difusão molecular entre a matriz rochosa e a fratura. A fratura é representada pela cor branca e a matriz rochosa pela cor cinza claro. As setas em cor preta indicam a direção do transporte advectivo e as setas em cor cinza indicam o transporte entre a fratura e a matriz rochosa. Fonte: Berkowitz *et al.* (2008).

Realizar a simulação computacional do transporte anômalo tem sido um dos maiores desafios da área de hidrogeologia, especialmente no meio geológico fraturado (Nowamooz *et al.*, 2013). Fourar (2006) e Fourar e Radilla (2009) descrevem o método do meio equivalente estratificado (*equivalente-stratified medium*) que representa as heterogeneidades do meio (isto é, permeabilidades) como função de distribuição probabilística, introduzindo um “fator de heterogeneidade” como parâmetro que controla a trajetória percorrida pelo soluto. Fiori e Becker (2015) e Jankovic *et al.* (2006) têm utilizado o modelo consistente (*Self-Consistent Model*, SCA), no qual o transporte é descrito essencialmente por advecção usando o tempo de viagem do soluto. No SCA o soluto atravessa uma série de inomogeneidades circulares que representam as diferenças de permeabilidade do meio fraturado (Figura 27).

Figura 27 – Representação esquemática do Self-Consistent Model mostrando o escoamento uniforme (U), as inhomogeneidades circulares (esferas de cor cinza claro) e as linhas equipotenciais no plano z dentro do domínio. Fonte: Jankovic *et al.* (2006).

Duas categorias de métodos numéricos são comuns para resolver a ADE: métodos Eulerianos e métodos Lagrangeanos. Métodos Eulerianos resolvem a equação ADE em uma grade (*grid*) ou rede espacial fixa. As abordagens comuns para este método são os esquemas de elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos. Métodos Lagrangeanos representam o transporte em um sistema de referência móvel, movendo partículas do soluto na trajetória (*pathlines*) que as partículas do fluido e do soluto seguem. Um exemplo de um método lagrangeano é o método do *random walk particle tracking* (Berkowitz *et al.*, 2006).

O método lagrangeano chamado *random walk*, primeiramente aplicado ao transporte de contaminantes em água subterrânea por Konikow e Bredehoeft (1978), representa o transporte de contaminantes pelo movimento de um número finito de partículas discretas, cada partícula associada com uma massa inicial de soluto. O nome *random-walk particle tracking* é também usado devido à necessidade de se saber a posição de cada partícula a cada passo no tempo. As partículas sofrem advecção por meio da solução de escoamento, sendo também deslocadas de forma aleatória por uma distribuição de probabilidades (Berkowitz *et al.*, 2001). Esta distribuição de probabilidades, geralmente normal (Kitanidis, 1994), modela dois fenômenos similares: difusão molecular, causada pelo gradiente de concentração de soluto e o caminho aleatório (também chamado de movimento browniano) que as partículas caminham. As etapas de advecção e dispersão são feitas para cada partícula, para cada passo em tempo. A Figura 28 mostra um exemplo de transporte anômalo após a injeção (contínua) de um

traçador químico conservativo dentro de uma fratura feita de resina Nowamooz *et al.* (2013).

Figura 28 – Transporte conservativo de traçador em uma fratura feita de resina. As maiores concentrações são representadas pela cor vermelha. O tempo de análise, t^* , foi adimensionalizado usando a razão entre a vazão e o volume da fratura.

Fonte: Nowamooz *et al.* (2013).

CAPÍTULO 3

Materiais e Métodos

3. MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia proposta está separada em quatro etapas principais: (i) a primeira etapa corresponde aos trabalhos de campo para retirada das amostras de basalto; (ii) a segunda, corresponde à utilização de uma técnica física para determinação da geometria da fratura; (iii) a terceira, compreende a obtenção de dados de escoamento e transporte por meio do experimento hidráulico e químico; (iv) e na quarta etapa, foi realizado ajuste da simulação de transporte aos dados obtidos em laboratório.

3.1 Coleta das amostras de basalto

Devido à importância do ASG como manancial de abastecimento público em regiões de forte ocupação urbana e por sua possível conectividade hidráulica com o Sistema Aquífero Guarani (Mocellin e Ferreira, 2009; Fernandes *et al.*, 2011), foram retirados quatro testemunhos de basalto da Formação Serra Geral. Os testemunhos foram retirados em uma área de afloramento (coordenadas geográficas WGS 21°54'16''S e 47°49'52''O; Figura 29), próxima a cidade de São Carlos-SP, onde o basalto fraturado surge em superfície. A área de afloramento (Figura 30) é uma pedreira pertencente ao Grupo Bandeirantes (afloramento Bandeirantes).

Figura 29 – Localização do afloramento Bandeirantes próximo a cidade de São Carlos. O município de São Carlos está indicado pela cor vermelha. Fonte: Arquivo do autor.

Figura 30 – Parede de rocha basáltica do afloramento Bandeirantes. Fonte: Arquivo do autor.

Os critérios (em ordem de importância) para a extração das amostras de basalto fraturado foram: a presença de uma única fratura natural subvertical (de possível origem tectônica) de ângulo médio de mergulho (formando ângulo entre 50 e 60° com a horizontal), suficiente altura em relação ao solo para retirada do bloco de rocha contendo a fratura, ausência de material de preenchimento dentro da fratura, presença de pontos de contato entre as paredes da fratura (fraturas não abertas). A justificativa para a extração de fraturas tectônicas subverticais é porque elas podem ter conectividade hidráulica com o Sistema Aquífero Guarani (Fernandes *et al.*, 2011).

Após identificação (na parede) da fratura a ser extraída (Figura 31a), o bloco de rocha (contendo a fratura identificada) era removida usando uma máquina retroescavadeira. Os blocos removidos eram marcados (Figura 31b) e encaminhados para o processo de perfuração. A perfuração dos blocos foi realizada usando uma perfuratriz portátil (marca Bosch®, modelo GDB 1600 WE) acoplada a uma serra cilíndrica com coroa diamantada (Figura 32). Foram utilizadas duas coras diamantadas, uma maior com diâmetro de 10,0 cm e outra menor, com diâmetro de 2,36 cm. A perfuratriz foi fixada em uma estrutura metálica para evitar imperfeições durante a perfuração. O motor da perfuratriz era refrigerado com água, de modo que essa água também se infiltrava dentro da fratura do bloco enquanto o bloco rochoso era perfurado. A duração da perfuração vertical de ~15 cm do bloco de basalto era de ~5 horas.

Figura 31 – (a) Identificação na parede das possíveis fraturas a serem extraídas e (b) marcação do bloco de rocha contendo a fratura identificada na parede. Fonte: Arquivo do autor.

Figura 32 – (a) Perfuratriz acoplada à serra de corte cilíndrica (10 cm de diâmetro) posicionada para perfurar o bloco de rocha contendo uma única fratura; e (b) detalhe da fratura do bloco.

Fonte: Arquivo do autor.

Após a perfuração, foi utilizado um equipamento de amostragem (amostrador), desenvolvido no Laboratório de Fenômenos de Transporte (LFT), para retirada das amostras cilíndricas de basalto, contendo uma única fratura. O amostrador foi confeccionado em chapas de aço com espessura suficiente para ser colocado no espaço que delimita o furo e a rocha (Figura 33b). Depois de posicionar o amostrador dentro do furo, parafusos tipo Allen eram apertados na parte superior do amostrador para que o esforço fosse transmitido até as duas chapas inferiores que fixavam a amostra. Em

seguida, um golpe era aplicado perpendicularmente a um eixo cilíndrico maciço para desprender a parte inferior da amostra do bloco.

Figura 33 – (a) Amostra (10 cm de diâmetro) fixada ao bloco rochoso após a perfuração; e (b) o amostrador (objeto de cor laranja) posicionado dentro do furo. Fonte: Arquivo do autor.

Depois que a amostra era retirada de dentro do amostrador, uma resina epóxi (marca Araldite®) de baixa viscosidade e tempo rápido de secagem (10 minutos) era aplicada à sua superfície externa para que fosse garantida a coesão da fratura. A amostra era colocada na posição vertical durante a aplicação da resina para que não houvesse infiltração de resina dentro da fratura. As amostras menores (2,36 cm de diâmetro) foram extraídas (Figura 34) ao lado e na mesma orientação de cada amostra grande (10 cm de diâmetro) correspondente, usando o mesmo procedimento descrito nesta seção.

Figura 34 – (a) Amostra (2,36 cm de diâmetro) fixada ao bloco rochoso após a perfuração; e (b) o amostrador (objeto de cor laranja) posicionado dentro do furo. Fonte: Arquivo do autor.

Após a perfuração e extração, as amostras grandes de basalto foram retificadas até que atingissem dimensões aproximadas de 10 cm de comprimento e 10 cm de diâmetro,

contendo (cada amostra) uma fratura posicionada no centro. Quatro amostras grandes (~11 cm de altura por ~10 cm de diâmetro) foram retiradas e também outras quatro amostras pequenas (2,36 cm de altura por 2,66 cm de diâmetro); todas as amostras contém uma única fratura. O plano da fratura, a direção e o sentido em que foram extraídas as amostras menores é o mesmo em relação aos planos em que foram extraídas as amostras maiores.

3.2 Medição da geometria da fratura

3.2.1 Microtomografia computadorizada de raios-X

A geometria da fratura das amostras pequenas (Figura 35) foi determinada por meio da técnica avançada, tridimensional e não destrutiva, chamada microtomografia computadorizada de raios-X.

Figura 35 – (a) Amostras pequenas de basalto fraturado; (b) amostra pequena de basalto usada para o ensaio de micro-CT. Fonte: Arquivo do autor.

O escaneamento das amostras foi realizado com o microtomógrafo, marca SkyScan (Bélgica), modelo 1172, do Laboratório de Técnicas Nucleares da Embrapa Instrumentação Agropecuária em São Carlos-SP. O sistema SkyScan 1172 opera com geometria cônica do feixe de raios-X (*cone-beam*), tubo de raios-X feito de tungstênio com ponto focal de 5 microns, uma câmera CCD (marca Hamamatsu®) de 12 bits com correção total de distorção, refrigerada com ar e 10 megapixel. Para otimizar o volume da amostra escaneada e obter a máxima resolução possível, a fonte de raios-x, o suporte

para a amostra e o detector podem ser simultaneamente movidos um em relação ao outro (Vaz *et al.*, 2011). O microtomógrafo operou em 100 kV/100 μ A com um filtro de alumínio/cobre (0,5 mm/0,04 mm de espessura) posicionado entre a amostra e o detector.

Durante a aquisição das imagens, a amostra foi rotacionada entre 180 e 360° com passo de rotação igual a 0,30°, resultando em sombras de projeção da imagem de 16 bits (radiografias). A resolução espacial do voxel (isotrópico) das imagens foi de 13,01 μ m e as projeções de sombra dos raios-X foram obtidas com o detector no modo de velocidade de aquisição 2K, resultando em imagens de 2000 (colunas) por 1048 (linhas). A profundidade da escala de tons de cinza foi de 12 bits (4096 níveis de brilho).

O algoritmo FDK (Feldkamp *et al.*, 1984) com pós-alinhamento, suavização e correção de artefatos do tipo *beam-hardening* e *ring* foi usado para reconstrução bidimensional das seções transversais (fatias) ou tridimensionais (dados de volume) a partir das sombras de projeções. A calibração do microtomógrafo foi realizada usando as mesmas amostras de basalto fraturado que foram escaneadas. Após o escaneamento (duração média de 1 hora e 20 minutos), o produto final obtido foi um conjunto de 938 fatias (ou imagens fatiadas) de 2000 por 2000 pixels com 8 bits, formato binário, extensão TIFF e tamanho de 4 MB para cada imagem. Para evitar movimentos indesejados durante o escaneamento, uma fita adesiva e massa de modelar foram usados para fixar as amostras no suporte de rotação do microtomógrafo.

3.2.2 Processamento digital das imagens de micro-CT

Esta seção descreve os procedimentos envolvidos na identificação computacional da fratura propriamente dita a partir do conjunto de imagens obtido pela técnica de micro-CT e também na obtenção de valores de abertura.

As 937 imagens ou fatias (2000 por 2000 pixels) obtidas a partir da técnica física de micro-CT foram redimensionadas para 1000 por 1000 pixels. Esse procedimento foi realizado para reduzir parte do ruído inerente e normalizar o conjunto de imagens de modo que, com a sobreposição das 938 imagens em três dimensões, a resolução em cada dimensão fosse similar (1000x1000x937 voxels). O ruído tipo “sal e pimenta” é usualmente proveniente do processo de transmissão de dados (Pitas e Venetsanopoulos, 1990; Gonzalez e Woods, 2000).

A técnica para identificação computacional da fratura foi a de segmentação (Gonzalez e Woods, 2000). Para facilitar o processo de análise e segmentação, as regiões

escuras exteriores à amostra foram excluídas e foi selecionada uma área específica das imagens onde o processamento seria realizado. Embora as imagens obtidas com o microtomógrafo tivessem formato aparentemente circular, observou-se que o círculo detectado se deslocava ligeiramente ao longo das 937 imagens, indicando uma inclinação na amostra usada na micro-CT. Com o objetivo de obter uma área de formato regular, o processamento foi realizado na área interior a um círculo de tamanho ligeiramente inferior ao observado nas imagens (Figura 36), cuja posição poderia ser considerada igual em todas as imagens.

Figura 36 – Área circular utilizada nas imagens de micro-CT. Fonte: Arquivo do autor.

Os pixels identificados como fratura aparecem com cor escura (preto) (Figura 36). No entanto, pequenas variações de cor fazem com que alguns pixels da fratura não sejam facilmente discrimináveis quando submetidos a uma simples separação por valor de luminância. Para identificar tais áreas de maneira apropriada, foi utilizado um conjunto de filtros gaussianos, com valores diferentes de desvio padrão, visando reforçar os padrões de fenda em baixas frequências. Foram aplicados filtros com máscaras de 5 e 7 pixels (nos dois eixos e apenas no eixo horizontal, respectivamente). Os resultados da aplicação de cada filtro foram então somados e para obtenção de uma imagem final com os valores médios em cada pixel. Foram verificados resultados obtidos com outros métodos, como a utilização de filtros de mediana e operadores morfológicos de dilatação e erosão, mas os resultados obtidos com os filtros gaussianos se mostraram visualmente mais adequados (Figura 37).

Figura 37 – Exemplo de uma imagem de micro-CT após a aplicação do filtro gaussiano com máscaras de 5 pixels nos eixos horizontal e vertical e de 7 pixels apenas no eixo horizontal.

Fonte: Arquivo do autor.

Após a aplicação dos filtros, aplicou-se um *thresholding* simples sobre os valores de pixels para determinar pontos escuros que pertencem a fraturas. A imagem binarizada obtida pode ser observada na Figura 38.

Figura 38 – Exemplo de uma fatia de imagem binarizada após a aplicação do *threshold*. Detalhe para os pixels escuros contínuos que formam a fratura no centro da amostra e para os outros pixels escuros isolados na matriz rochosa da amostra. Fonte: Arquivo do autor.

O valor usado para *threshold* foi obtido classificando manualmente os pixels de uma das imagens de acordo com características visuais e em seguida aplicando a

segmentação com valores diferentes, selecionando o valor que mais correspondesse à análise manual. Os filtros aplicados anteriormente reduzem a presença de pontos escuros isolados, por exemplo, devido ao ruído na imagem. Para garantir que somente os pixels escuros da fratura fossem identificados, apenas as massas de pixels de grande magnitude e pixels escuros próximos a elas foram considerados (Figura 39).

Figura 39 – Exemplo de uma fatia de imagem após a aplicação do *threshold* e da indexação de massas de pixels pretos contínuos. Detalhe para os pixels escuros contínuos que formam a fratura no centro da amostra. Fonte: Arquivo do autor.

Após a segmentação das imagens, os pixels que formam a fratura foram identificados computacionalmente (Figura 39). As imagens foram concatenadas em um bloco de voxels usando o *software* ImageJ®. Os valores de abertura foram obtidos somando a quantidade de pixels detectados no eixo vertical (z) em cada posição (x,y) da imagem.

A abertura mecânica (ou média), b_e , foi calculada considerando o campo de abertura obtido por meio da técnica de micro-CT e processamento digital de imagens. Foi estabelecida a hipótese de que os processos de ruptura e de propagação das fraturas das amostras grande e pequena foi o mesmo. Essa hipótese implica que provavelmente a média, o desvio-padrão e a distribuição espacial das rugosidades presentes nas fraturas das amostras pequena e grande também são as mesmas.

Cada valor de abertura, $b(x,y)$, foi obtida pela amostragem de pontos discretos (grade regular de 26,02 por 26,02 μm) perpendiculares ao plano x e y da fratura (Equação

1). O valor médio das aberturas locais (ou discretas) ao longo das direções x e y (Figura 8) é denominado de abertura mecânica, a qual foi calculada como (Noiriel *et al.*, 2013):

$$b_e = \frac{1}{HW} \int_{x=0}^H \int_{y=0}^W b(x,y) dx dy$$

Equação 11

A razão entre a b_e e o desvio-padrão do campo de abertura, σ_b , foi usada como parâmetro para quantificar o grau de variabilidade macroscópica da abertura. Essa razão também foi usada para comparar a diferença entre a abertura mecânica e a “abertura equivalente” hidráulica (veja Brown, 1987; Méheust e Schmittbuhl, 2001; Wendland e Himmelsbach, 2002).

3.3 Montagem do aparato hidráulico

O experimento hidráulico foi realizado em uma das quatro amostras grandes de basalto fraturado. Uma camada de adesivo estrutural, bicomponente, à base de resina epóxi (Sikadur®32) foi aplicada à superfície externa da amostra para garantir que a água injetada (sob pressão) não escoasse por nenhuma outra região além das tomadas de entrada (base) e saída (topo) da amostra. O adesivo Sikadur®32 apresenta um primeiro e segundo tempo de cura de 5 horas e 7 dias, respectivamente, excelente aderência à superfície da amostra de basalto e alta resistência à compressão (90 MPa).

Após a aplicação da resina, foram utilizadas duas placas cilíndricas de acrílico sobre as superfícies da base e do topo da amostra. Em cada placa de acrílico foi confeccionado um orifício para permitir o escoamento de água através de um único ponto de entrada e de saída ao longo do comprimento da fratura (Figura 40). Sob cada orifício foi encaixado um conector (septo) de três vias na entrada e um outro de duas vias na saída: a primeira via do septo foi usada para tomada da diferença de pressão entre o ponto de entrada e saída de água; a segunda foi obstruída com uma camada de teflon para realizar o experimento com traçador químico; e a terceira via foi utilizada para conectar a mangueira de alimentação de água. Foram empregadas mangueiras transparentes de poliuretano (diâmetro interno de 6 mm para pressões de até 10 bar) para alimentação de

água. O volume da água dentro dos orifícios de entrada é de aproximadamente 1,6 mL e na saída o volume é desprezível.

Figura 40 – (a) Representação esquemática da Amostra de basalto fraturado encaixada entre placas de acrílico, as quais estão fixadas por meio das quatro barras de alumínio com rosca. Os retângulos em azul indicam a entrada e saída de água; e (b) Amostra de basalto fraturado (impermeabilizada com resina) encaixada entre placas de acrílico. Fonte: Arquivo do autor.

Os perímetros dos orifícios foram vedados com uma junta de borracha em formato de anel (*o-ring*) para que não houvesse vazamento de água (Figura 40). As duas placas foram amarradas por meio de uma armação de alumínio composta por quatro fusos de rosca presos por parafusos tipo borboleta (Figura 40). Conforme os parafusos eram apertados, as placas de acrílico comprimiam a base e o topo da amostra e, dessa maneira, o *o-ring* era esmagado, garantindo a vedação contra vazamentos de água nos orifícios de entrada e saída.

A saturação da amostra foi realizada por meio da injeção de água deionizada (fluxo ascendente) usando uma bomba peristáltica de baixa vazão, com regulação automática de pressão, marca Gilson®, modelo Minipuls 3. A amostra permaneceu sob saturação durante 90 dias, até que fossem iniciados os testes hidráulicos e químicos. A amostra (selada com resina) dentro do suporte hidráulico foi conectada ao circuito

hidráulico composto por bomba peristáltica, manômetro diferencial de mercúrio, mangueiras e registros (Figura 41).

Figura 41 – (a) Fotografia do aparato hidráulico e (b) representação esquemática dos componentes do aparato hidráulico. A seta vermelha indica o sentido do escoamento. Fonte: Arquivo do autor.

A vazão de saída foi medida pelo método gravimétrico usando uma balança analítica de alta resolução e precisão, marca Shimadzu®, modelo AUX320. A massa de água na saída era registrada em intervalos de tempo conhecidos para cada vazão selecionada na bomba. Para cada rotação selecionada no painel da bomba, obtinha-se uma vazão de água diferente dentro da fratura. A temperatura da água foi registrada usando um termômetro para cálculo da massa específica da água. A temperatura do ar dentro da sala (entre 18 e 20° C) onde o experimento foi realizado era controlada por um ar condicionado. A diferença de pressão entre a porta de entrada e a porta de saída da fratura foi feita usando um manômetro diferencial, contendo o mercúrio como fluido manométrico. A resolução da bomba, do manômetro e da balança analítica é igual a 0,01 rpm (de 0 até 9,99 rpm), 1,0 mmHg e 0,1 mg, respectivamente.

Foram realizadas 7 medidas do gradiente hidráulico em função da taxa de escoamento volumétrico de água (de 0,095 até 0,64 mL.min⁻¹) através do plano da fratura da amostra. O coeficiente de determinação (R^2) entre o gradiente hidráulico e a vazão total e o número de Reynolds (Re) foram usados como indicativo do tipo de regime de escoamento macroscópico (laminar ou turbulento).

3.4 Cálculo da abertura da fratura

Os três tipos de “aberturas equivalentes” da fratura da amostra grande foram calculados de acordo com Tsang (1992): cúbica ou hidráulica (b_c), de perda por atrito (b_l) e de balanço de massa (b_m).

$$b_c = \left(\frac{12\eta QW}{\gamma H |\Delta h|} \right)^{1/3}$$

Equação 12

$$b_l = W \left(\frac{12\eta}{\gamma |\Delta h| t_m} \right)^{1/2}$$

Equação 13

$$b_m = \frac{Qt_m}{WH}$$

Equação 14

sendo (Fahim e Wakao, 1982):

$$t_m = \frac{\int_0^\infty C_{out}(t)dt}{\int_0^\infty C_{out}(t)dt} - \frac{\int_0^\infty C_{in}(t)dt}{\int_0^\infty C_{in}(t)dt}$$

Equação 15

Onde, η [M.L⁻¹.T⁻¹] é a viscosidade dinâmica do fluido; Q [L.T⁻³] é a vazão total através da fratura; W [L] é o comprimento da fratura na direção do escoamento (Figura 16); γ [M.L⁻².T⁻²] é o peso específico do fluido; H [L] é a largura da fratura na direção perpendicular ao escoamento (Figura 16); ∇h [L.L⁻¹] é o gradiente hidráulico ($\nabla h = \Delta h/W$), onde, $h = (p/\rho g + z)$, sendo z = carga de posição [L], e p = pressão hidrostática [M.L⁻¹.T⁻²]; t_m [T] é o tempo médio de residência de um traçador dentro da fratura; $C_{out}(t)$ [M.L⁻³] e $C_{in}(t)$ [M.L⁻³] representam, respectivamente, a concentração do traçador no instante t [T] nas tomadas de saída e entrada da fratura.

A “abertura equivalente” hidráulica (Equação 12) é originada a partir da Lei Cúbica (Witherspoon *et al.*, 1980). A Lei Cúbica é resultante de simplificações realizadas a partir das equações de Navier-Stokes, N-S (Anexo I).

As velocidades médias correspondentes a cada “abertura equivalente”, v_c [L.T⁻¹], v_l [L.T⁻¹] e v_m [L.T⁻¹], foram calculadas por:

$$v_c = \frac{Q}{Hb_c}$$

Equação 16

$$v_l = \frac{Q}{Hb_l}$$

Equação 17

$$v_m = \frac{Q}{Hb_m}$$

Equação 18

A aproximação da geometria da fratura sendo duas placas paralelas com abertura constante foi considerada válida. Os valores constantes das “aberturas equivalentes” (b_e , b_l e b_m) e o valor da abertura mecânica (b_e) foram empregados no cálculo da velocidade média uniforme. A velocidade média uniforme foi incorporada na solução analítica da Equação de Advecção-Dispersão (ADE).

3.5 Injeção e monitoramento do traçador

O estudo do transporte de soluto através do plano da fratura da amostra grande foi realizado por meio da injeção de um traçador químico conservativo. A fluoresceína de sódio (Uranina, $C_{20}H_{10}Na_2O_5$), marca Sigma-Aldrich®, estado sólido na forma de pó, número CAS 518-47-8, peso molecular de 376,27 $g \cdot mol^{-1}$, alta solubilidade em água (1 $mg \cdot ml^{-1}$) e coloração laranja na forma em pó e verde fluorescente em solução aquosa foi usada como traçador conservativo. A fluoresceína de sódio é um dos corantes fluorescentes mais aplicados em experimentos de traçadores porque possui um comportamento conservativo (Hoehn *et al.*, 1998). O comportamento conservativo pressupõe que sejam mínimas as reações físico-químicas (adsorção, por exemplo) entre o traçador e as paredes da fratura. A Uranina é adequada em experimentos com traçadores por causa da capacidade de emitir intensidades de luz (visível) quando exposta a uma fonte de radiação (fluorescência). O fenômeno da fluorescência é útil por causa do seu baixo limite de detecção e baixo custo de análise.

A injeção da Uranina foi realizada por pulso (ou instantânea), usando uma seringa de vidro, marca Hamilton®, volume máximo de 2,5 mL e resolução de 0,05 mL, agulha não removível de aço inoxidável, e êmbolo com trava de teflon na ponta. A seringa foi encaixada em uma bomba de seringa (Figura 42), marca Cole Parmer®, modelo 74900. O volume e o tempo de duração do pulso de injeção da Uranina dentro do septo foram de 0,11 mL e 30 segundos, respectivamente.

Figura 42 – (a) Seringa usada para a injeção do traçador; e (b) seringa (parcialmente preenchida com o traçador) encaixada na bomba de seringa. Fonte: Arquivo do autor.

A agulha da seringa foi encaixada dentro de uma das vias do septo de entrada de água, localizado na base da amostra. O orifício em que foi encaixado o septo possui um volume de água de $\sim 1,60$ mL até a entrada da fratura, propriamente dita (Figura 43).

Figura 43 – Detalhe da agulha dentro de uma das vias do septo de entrada. O volume de água dentro do orifício em que o septo foi encaixado é de $\sim 1,60$ mL. Fonte: Arquivo do autor.

Durante o tempo de injeção do traçador (em pulso) dentro do septo, a bomba peristáltica foi desligada e em seguida, imediatamente após o término da injeção, foi religada para manter uma vazão constante até o término do ensaio. Foram realizados três ensaios com o traçador, sendo que o único parâmetro modificado foi a vazão de água: no primeiro, a vazão foi de $0,095 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$, no segundo foi de $0,238 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ e no terceiro, foi de $0,331 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$.

O monitoramento da concentração da Uranina ao longo do tempo na saída da fratura foi feito usando um espectrofotômetro portátil (Figura 44a), marca Ocean Optics®, modelo USB2000-Vis-UV, faixa espectral de leitura entre 350 e 1000 nm, grade #3, diâmetro da fenda de entrada de luz igual a $200 \mu\text{m}$. O espectrofotômetro foi programado para operar no modo de absorbância, isto é, medida da intensidade de luz absorvida pelo traçador em relação à intensidade de luz fornecida por uma fonte de luz. A intensidade de luz absorvida pelo traçador (diluído na água que escoava através da fratura) é proporcional à concentração do traçador, da intensidade de luz fornecida pela fonte e da espessura (ou caminho óptico) do meio que a luz está atravessando (lei de Lambert-Beer; Equação 10). As medidas de absorbância foram convertidas em medidas de concentração por meio de um ajuste linear usando soluções de traçador com concentrações conhecidas.

Durante o intervalo de tempo de aquisição da absorbância (7 milissegundos) o espectrofotômetro registava 500 medidas. O tempo total para registro de uma medida (média de todas as medidas em 7 milissegundos) foi de 3,5 segundos. O ajuste das configurações de aquisição, registro e armazenamento das medidas foram feitas por meio do *software SpectraSuite* (Figura 44b), da marca Ocean Optics®.

Figura 44 – (a) Espectrofotômetro Ocean Optics conectado a um cabo USB e à fibra óptica; e (b) Computador mostrando a tela de aquisição de medidas de intensidade de luz do *software SpectraSuite*. Fonte: Arquivo do autor.

Uma lâmpada de LED de alto brilho (5 W) azul foi usada como fonte de luz para excitar a Uranina no ponto de saída da fratura (Figura 45). A lâmpada de LED foi ligada utilizando uma fonte de tensão, marca Hikari®, operando de modo de corrente contínua constante (0,20 A).

Figura 45 – (a) Sistema *inline* de monitoramento da concentração do traçador na saída da fratura; (b) Detalhe da cela de fluxo, lâmpada de LED azul e da fibra óptica; e (c) Detalhe da cela de fluxo em formato de Z. O LED e a fibra óptica estavam posicionados para execução do experimento de absorvância. Fonte: Arquivo do autor.

Após ser transportada pelo plano da fratura, a Uranina foi conduzida por uma mangueira (com volume de água desprezível) até uma cela de fluxo de quartzo. A luz azul

era incidida através da cela de fluxo na direção do transporte da Uranina, e no mesmo sentido, porém em direção oposta, era posicionada uma fibra óptica (diâmetro de 100 μm , marca Ocean Optics®) para capturar a intensidade de luz refletida pela Uranina (Figura 45). Dessa maneira, a Uranina absorvia uma parte da intensidade de luz azul, entre os comprimentos de onda de 450,31 e 480,15 nm, emitida pela lâmpada de LED e permitia a passagem de outra parte da intensidade de luz azul. Um *cooler* de computador foi posicionado atrás da lâmpada de LED para dissipação do calor, evitando a alteração da intensidade de luz produzida pelo LED.

Essa configuração de monitoramento da concentração do traçador é chamada de *inline* (Figura 46). O sistema *inline* é eficiente porque permite a tomada de diversas medidas de concentração do traçador em curtos intervalos de tempo, preserva as características do sistema, evitando a retirada de amostras de traçador, e diminui o erro de medição de fluorescência porque evita o contato da amostra com outros frascos ou recipientes.

Figura 46 – Sistema *inline* de monitoramento da concentração do traçador fluorescente (Uranina). Fonte: Arquivo do autor.

As concentrações relativas do traçador ($C(t)/C_0$) foram monitoradas em função do tempo e representadas em formato de gráficos, as chamadas curvas de passagem (*breakthrough curves*).

3.6 Simulação do transporte dentro da fratura

A simulação computacional do transporte conservativo (não reativo) de traçador através da fratura da amostra grande foi realizada por meio de uma solução analítica da Equação de Advecção-Dispersão (*Advection-Dispersion Equation*, ADE) (Bear, 1979):

$$\frac{\partial C}{\partial t} - v \nabla C + \nabla \cdot (D \nabla C) = 0$$

Equação 19

Em que C [$M.L^{-3}$] é a concentração do soluto; t [T] é o tempo; D [$L^2.T^{-1}$] é o tensor de dispersão hidrodinâmica. Por causa da baixa permeabilidade primária ($k = 10^{-14} \text{ m}^2$) da matriz rochosa de basalto, a influência do efeito difusivo na matriz foi negligenciada (veja Endo *et al.*, 1984; Long e Witherspoon, 1985; Nowamooz *et al.*, 2013), isto é, foi considerado somente o transporte no plano da fratura. O tensor de dispersão hidrodinâmica é usualmente calculado pela seguinte expressão (Bear, 1979):

$$D = \alpha_L \cdot v + D_m$$

Equação 20

Onde, α_L [L] é a dispersividade longitudinal na direção do escoamento e D_m [$L^2.T^{-1}$] é o coeficiente de difusão molecular do soluto no fluido.

Admitindo a hipótese de que o transporte de soluto dentro da fratura experimental pode ser representado pelo modelo de placas planas paralelas com uma abertura constante ou “equivalente”, a solução analítica unidimensional (1D) da ADE pode ser usada para simular o transporte conservativo, com as seguintes condições iniciais e de contorno (van Genuchten, 1981):

$$\begin{aligned} C(y, 0) &= 0, & y > 0 \\ \int_t^\infty \frac{\partial C(y, t)}{\partial y} &= \text{finito}, & t \geq 0 \\ C(0, t) &= C_0 \cdot \exp(-\lambda t), & y = 0 \end{aligned}$$

Equação 21

Onde y [L] é a distância ao longo do eixo y na direção do escoamento; t [T] é o tempo a partir de injeção do traçador; $C(x,t)$ [M.L⁻³] é a concentração do traçador na distância y e no tempo t ; C_0 [M.L⁻³] é a concentração em $y=0$ e $t=0$; λ [T⁻¹] é a constante de decaimento do traçador dentro do septo de entrada. A solução analítica para Equação 19 é (van Genuchten, 1981):

$$C(y,t) = C_0 \cdot \exp(-\lambda t) \cdot \left\{ \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(v-\omega)y}{2D}\right] \cdot \operatorname{erf}\left[\frac{y-\omega t}{\sqrt{4Dt}}\right] + \frac{1}{2} \cdot \exp\left[\frac{(v-\omega)y}{2D}\right] \cdot \operatorname{erfc}\frac{(v+\omega)y}{2D} \right\}$$

Equação 22

$$\omega = v \cdot \left[1 - \frac{4\lambda D}{v^2} \right]^{1/2}$$

Equação 23

Por causa do significativo volume dentro do septo de entrada, a concentração medida (C_0) foi ajustada com o objetivo de representar a concentração real de soluto entrando na fratura. O septo de entrada (Figura 43), o qual foi considerado um reator de mistura completa sob escoamento contínuo, foi modelado usando um balanço de massa:

$$QC_{in}(t) - QC_{out}(t) = V_{ol} \cdot \frac{dC_{out}(t)}{dt}$$

$$\int C_{out}(t) = \frac{M}{V_{ol}}$$

Equação 24

Onde, $C_{in}(t)$ [M.L⁻³] representa a concentração de soluto entrando no septo no tempo t ; $C_{out}(t)$ [M.L⁻³] representa a concentração de soluto saindo do septo e entrando na fratura no tempo t ; V_{ol} [L³] é volume do septo de entrada; e M [M] é a massa de traçador injetada. A solução para a Equação 24 é dada por:

$$C_{out}(t) = \frac{M}{V_{ol}} \cdot \exp\left(-\frac{Q}{V_{ol}}t\right)$$

Equação 25

A Equação 25 indica que a concentração do soluto no septo de entrada decai exponencialmente, por isso, as constantes λ e C_0 e são calculadas como:

$$\lambda = \frac{Q}{V_{ol}}$$

Equação 26

$$C_0 = \frac{M}{V_{ol}}$$

Equação 27

A solução analítica da ADE (Equação 22) foi implementada no *software* Matlab® e os parâmetros v e α_L foram ajustados utilizando o método grade de busca (*search grid*). A implementação do algoritmo *search grid* é simples e baseia-se na combinação de todas as possibilidades de valores entre dois ou mais vetores. Dessa maneira, foi criado um vetor v (com intervalo entre 0 e 2 cm.min⁻¹, variando em 0,1 cm.min⁻¹) e um outro vetor α_L com intervalo entre 0 e 5 cm, variando em 0,1 cm. O algoritmo *search grid* buscava todas as combinações possíveis entre esses dois parâmetros até que fosse atingido o critério de parada. O critério de parada para o algoritmo *search grid* adotado foi a métrica estatística chamada *Mean Square Error* (MSE) (Gupta *et al.*, 2009). O MSE é uma métrica que mede a qualidade do ajuste entre o modelo matemático (no caso, a solução analítica da ADE) e os dados medidos observados:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{ADE} - C_{obs})^2$$

Equação 28

Onde, N é o número de pontos amostrais, C_{ADE} [M.L⁻³] e C_{obs} [M.L⁻³] são, respectivamente, a concentração estimada pela solução analítica da ADE (Equação 22) e a concentração medida no experimento usando a técnica de espectrofotometria. Quanto menor o valor do MSE, melhor é considerado o ajuste.

Como toda métrica estatística condensa um conjunto de dados em um único valor, ela apenas fornece uma projeção dos erros do modelo matemático enfatizando apenas uma determinada característica do erro de desempenho do modelo (Chai e Draxler, 2014).

Outra abordagem foi o uso de valores pré-definidos de velocidade média calculados a partir das “aberturas equivalentes” (Equação 16, Equação 17, Equação 18) e da abertura mecânica (Equação 11).

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussões

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Abertura da fratura

Os métodos empregados nas técnicas de micro-CT e processamento digital de imagens permitiram a obtenção de uma imagem tridimensional de alta qualidade (938 por 719 pixels com resolução espacial de 26 μm cada pixel) das aberturas da fratura (Figura 47) e também a reconstrução 3D da amostra (Figura 48). Os valores das aberturas estão predominantemente entre o intervalo de 0 e 300 μm e algumas regiões isoladas possuem aberturas entre 400 e 450 μm (Figura 47). O valor da abertura mecânica $\pm$ desvio-padrão da fratura (amostra pequena) foi de $117,21 \pm 47,40 \mu\text{m}$ e o coeficiente de variação (cv) foi igual a 0,40. O volume da fratura, calculado com a abertura mecânica, foi de 1,42 mL.

Figura 47 – Campo de abertura da fratura (amostra pequena). Caso essa amostra fosse utilizada para o ensaio hidráulico, o escoamento ocorreria da esquerda para a direita. A escala de cores indica ausência de abertura (valor 0 μm) e máxima abertura (500 μm). Fonte: Arquivo do autor.

A abertura mecânica, b_e , da amostra natural de basalto pode ser considerada pequena em relação às aberturas (medidas e não estimadas) de outros estudos da literatura, os quais os quais frequentemente realizam experimentos com traçadores dentro de fraturas milimétricas (entre 0,2 e 5,0 mm) naturais (Huber *et al.*, 2012; Wang e Cardenas, 2014) e artificiais (Stockman *et al.*, 2001; Boutt *et al.*, 2006; Cai *et al.*, 2007; Schmittbuhl *et al.*, 2008; Bauget e Fourar, 2008; Zheng *et al.*, 2008; Lee *et al.*, 2014). Tang e Weisbrod (2009) realizaram um dos poucos experimentos com traçadores em uma única fratura natural com abertura pequena ($139 \pm 7 \mu\text{m}$).

Figura 48 – (a) Representação 3D da amostra fraturada; (b) fotografia digital da vista superior da amostra pequena e (c) representação tridimensional (vista superior). Os retângulos vermelhos são regiões de controle para comparação entre (b) e (c). Fonte: Arquivo do autor.

A técnica de micro-CT mostrou-se eficiente por causa do rápido tempo de aquisição (1 hora e 20 minutos) das fatias de imagens e da capacidade de não destruir a amostra. Em algumas regiões da fratura, os pixels apresentaram tons de cinza que tornaram difícil a distinção entre matriz rochosa e fratura (Figura 49a). Essas regiões duvidosas ocorreram devido aos ruídos nas imagens e podem ser regiões em que a fratura é interrompida por causa de pontos de contato entre as paredes da mesma. A fratura (espaço vazio) é representada pela escala de cinza entre 0 e 80 (Figura 49c) e a matriz rochosa apresenta valores entre 80 e 255.

Figura 49 – (a) Fatia da amostra de basalto fraturado. O retângulo vermelho representa alguns pixels duvidosos (possíveis contatos entre as paredes da fratura). (b) Seção (linha amarela) sob a qual foram obtidos os níveis (ou tons) de cinza; e (c) Níveis de cinza da fratura observada na seção destacada em (a). Fonte: Arquivo do autor.

Alguns pixels apresentaram níveis de cinza característicos da matriz rochosa no meio do plano da fratura, interrompendo a abertura ao longo de uma posição x,y do plano. Os pixels que interrompem a abertura da fratura $b(x,y)$ podem ser ruídos da imagem ou fragmentos de preenchimento. Nessas situações, o conceito de abertura de fratura torna-se questionável (Gouze *et al.*, 2003). Para simplificação do campo de abertura, esses pixels foram contabilizados como pontos de contato entre as paredes da fratura, isto é, ausência de abertura. O tempo de processamento mais rápido para a representação 3D da amostra (Figura 48) no *software* ImageJ®, considerando 1000 x 1000 x 938 voxels, foi de ~2 minutos em um computador desktop Intel Core® i7-4790, processador de 3,6 GHz e memória RAM de 16 GB.

Os resultados dos testes de normalidade de dados (Shapiro-Wilk e Anderson-Darling) indicam que a distribuição de probabilidade normal não é adequada para os valores de abertura (Tabela 1). Por outro lado, o teste estatístico de Kolmogorov-Smirnov (de menor potência) indica que os valores de abertura seguem uma distribuição normal. As distribuições do tipo normal (Matsuki *et al.*, 2006; Vickers *et al.*, 1992; Yeo *et al.*, 1998; Schmittbuhl *et al.*, 2008; Neuville *et al.*, 2012; Oron e Berkowitz, 1998) e lognormal têm sido as mais utilizadas nos estudos sobre fraturas em escala de laboratório (Moreno e Tsang, 1994; Zimmerman e Bodvarsson, 1996; Pyrak-Nolte *et al.*, 1997; Keller, 1998; Wendland e Himmelsbach, 2002; Zheng *et al.*, 2008; Nowamooz *et al.*, 2013; Wang e Cardenas, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015).

Tabela 1 – Testes estatísticos de normalidade dos valores de abertura. A hipótese nula é a de que os dados seguem uma distribuição do tipo normal.

Teste estatístico	Nível de significância	p -valor	Resultado
Shapiro-Wilk	0,05	<0,001	Hipótese nula rejeitada
Kolmogorov-Smirnov	0,05	0,310	Hipótese nula aceita
Anderson-Darling	0,05	<0,001	Hipótese nula rejeitada

O gráfico Quantil-Quantil dos valores de abertura indica que os dados não seguem uma distribuição normal e possuem assimetria em direção aos maiores valores de abertura (Figura 50). A assimetria presente no gráfico Quantil-Quantil é um indicativo de que a distribuição lognormal é adequada para os valores de abertura. Apesar da frequência dos maiores valores (entre 250 e 500 μm) de abertura ser expressivamente inferior ($<2.10^4$; ver Figura 50) em relação aos demais valores, algumas aberturas (entre 250 e 350 μm)

podem estar conectadas hidraulicamente entre si e conduzir o escoamento de água (Figura 47). De acordo com o gráfico Quantil-Quantil e os testes de Shapiro-Wilk e Kolmogorov-Smirnov, foi aceita a hipótese de que os valores de abertura, obtidos a partir da técnica de micro-CT, seguem uma distribuição lognormal.

Figura 50 – (a) Gráfico Quantil-Quantil e (b) histograma de aberturas, mostrando que as aberturas seguem uma distribuição de probabilidade lognormal com assimetria (*skewness* = 0,67 e *kurtosis* = 4,11). Fonte: Arquivo do autor.

O resultado das “aberturas equivalentes” mostrou que a abertura de balanço de massa (b_m) foi maior em relação à abertura hidráulica (b_c), a qual foi maior que a abertura de perda por atrito (b_l) (Tabela 2). Essa inequidade dos valores de “abertura equivalente” está em concordância com os trabalhos teóricos de Tsang (1992), Gelhar (1993) e experimental de Zheng *et al.* (2008). A abertura de balanço de massa obtida neste trabalho foi de uma ordem de magnitude maior que a abertura hidráulica. Hjerne e Nordqvist (2014) mostraram um resultado semelhante, por meio de testes hidráulicos e com traçador

em escala de campo, em que a abertura de b_m foi entre uma e duas ordens de magnitude maior que b_c .

Tabela 2 – Valores das “aberturas equivalentes” e volume da fratura (amostra grande).

Experimento com traçador	Dimensão da amostra (cm)	"Aberturas equivalentes" (mm)			Volume estimado da fratura (mL)		
		b_m	b_c	b_l	baseado em b_m	baseado em b_c	baseado em b_l
BTC-01	10,21 x 11,92	0,119	0,0130	0,0044	1,45	0,16	0,05
BTC-02		0,124	0,0016	0,0060	1,51	0,02	0,07
BTC-03		0,116	0,0016	0,0060	1,41	0,02	0,07

A diferença entre b_e e b_c é justificada pela heterogeneidade da abertura da amostra de basalto, isto é, presença de rugosidades e pontos de contato entre as paredes da fratura. As rugosidades impõem que o escoamento ocorra por regiões de menor resistência e de maneira tortuosa, diferente do escoamento idealizado no modelo de placas planas paralelas. Watanabe *et al.* (2008) mostraram que o aumento da proximidade entre as paredes rugosas das fraturas desvia o valor da abertura média em relação a b_c em até uma ordem de magnitude (por exemplo, $b_e = 2,8 \mu\text{m}$ e $b_c = 64 \mu\text{m}$). Neste trabalho, a diferença entre b_e e b_c é maior em relação aos valores reportados na literatura científica. Por exemplo, Hakami e Larsson (1996) e Gentier (1990) mostram que para amostras de fraturas entre 0,5 e 5,0 mm a abertura média (valores medidos experimentalmente) é ~1,4 vezes maior em relação à abertura hidráulica.

O valor da abertura mecânica, b_e , a qual por aproximação é igual média aritmética do campo de abertura, representa ~93% do valor obtido para b_m . De acordo com o desvio-padrão obtido para a abertura mecânica, pode-se inferir que b_m é igual a b_e . Esse resultado experimental reforça a teoria de que a abertura de balanço de massa, por definição, representa corretamente o espaço vazio da fratura por onde o soluto é transportado e, consequente, a média aritmética do campo de abertura (Tsang, 1992).

4.2 Regime de escoamento

A relação linear entre o gradiente hidráulico e a vazão (Figura 51) indica que o regime de escoamento macroscópico dentro da fratura é laminar. Esse resultado valida a

simplificação do regime de escoamento (laminar) feita para aplicação da lei cúbica. O valor do número de Reynolds (Re) usando a abertura mecânica foi de 0,016. Os trabalhos científicos têm mostrado que a lei de Darcy é válida para baixo regime de escoamento ($Re \ll 1$) enquanto o escoamento não linear pode ocorrer para $Re > 1$ (Cherubini *et al.*, 2012).

Figura 51 – Resultado experimental entre a vazão e o gradiente hidráulico dentro da fratura da amostra grande. A linha azul é o ajuste linear e a barra de erros representa o desvio-padrão de cada medida. Fonte: Arquivo do autor.

O resultado do número de Reynolds sugere que no escoamento laminar através de toda a fratura há o predomínio das forças viscosas sobre as forças inerciais, porque Re é menor que 1. Esse resultado indica que possíveis forças inerciais presentes no regime de escoamento microscópico não desviam o regime macroscópico da linearidade, considerando o intervalo de vazões utilizadas. Não foi possível avaliar o regime de escoamento microscópico, mas é esperado que nas regiões com brusca mudança na

abertura e/ou presença de pontos de contato (abertura nula), as forças inerciais sejam maiores que as forças viscosas ou simplesmente haja presença dessas forças inerciais.

4.3 Transporte de solutos

4.3.1 Solução analítica com abertura constante

A simulação do transporte conservativo (injeção em pulso) usando a solução analítica 1D da ADE (van Genuchten, 1981) foi realizada considerando a dispersividade (α_L) como o parâmetro ajustável e a velocidade média do escoamento (Equação 16, 17 e 18) foi pré-determinada de acordo com o valor de cada “abertura equivalente” e também da abertura mecânica, b_e . Os resultados dos parâmetros obtidos nas simulações do transporte foram apresentados na Tabela 3. As curvas de recuperação de massa do traçador foram apresentadas no Anexo II.

Tabela 3 – Resultado dos parâmetros usados na simulação do transporte conservativo.

Experimento com traçador	Velocidade média (cm/min) baseado em				MSE baseado em				Dispersividade (cm) baseado em			
	b_e	b_m	b_c	b_l	b_e	b_m	b_c	b_l	b_e	b_m	b_c	b_l
BTC-01	0,80	0,78	7,15	21,2	1,11	1,12	3,19	3,61	0,1	0,1	5,0	5,0
BTC-02	1,99	1,88	14,57	38,9	1,51	1,56	3,84	4,40	0,1	0,1	5,0	5,0
BTC-03	2,77	2,79	20,26	54,00	1,49	1,49	3,87	4,41	0,1	0,1	5,0	5,0

O resultado da simulação usando a solução analítica da ADE mostrou que entre os tipos de “abertura equivalente”, a abertura de balanço de massa é a que melhor se ajustou ($1,12 \leq \text{MSE} \leq 1,56$) às três curvas de passagem (Figura 52, Figura 53 e Figura 54). Esse resultado evidencia que a abertura de balanço de massa é a única que pode ser propriamente chamada de “abertura equivalente” para descrever o transporte conservativo de soluto dentro de uma única fratura. Os trabalhos de Zheng *et al.* (2008), Rodrigues *et al.* (2013) e de Hjerne e Nordqvist (2014) também mostraram que b_m é mais adequado (entre as aberturas equivalente) para simular o transporte Fickiano (advecção-dispersão) de solutos não reativos.

Figura 52 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,095 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 91% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de ~ 15 minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor.

Por causa da facilidade de obtenção dos parâmetros, a “abertura equivalente” hidráulica tem sido utilizada na maior parte dos estudos sobre escoamento de água e transporte de contaminantes em fraturas, na escala de campo (Becker e Shapiro, 2000; Klimczak, 2010) e de laboratório (Zvikelsky e Weisbrod, 2006; Tang e Weisbrod, 2009; Cherubini *et al.*, 2012). No entanto, neste trabalho os resultados das simulações

empregando a abertura hidráulica (Figura 52, Figura 53 e Figura 54) não foram satisfatórios ($3,19 \leq \text{MSE} \leq 3,87$). A diferença entre os valores absolutos de MSE de b_c e b_m foi relevante (aproximadamente 75%), indicando que a abertura hidráulica é menos apropriada em relação à abertura de balanço de massa.

Figura 53 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-02) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,238 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 99% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de $\sim 6,3$ minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor.

No caso da ADE-1D usando os valores de b_c , apesar da dispersividade ($\alpha_L = 5,0$ cm) representar satisfatoriamente o formato da cauda da BTC-01 (Figura 52), a velocidade média não capturou corretamente o tempo de residência (diferença de ~15 minutos). Isso ocorre porque o cálculo da velocidade média usando b_c (Equação 16) pressupõe que a fratura é um canal formado por placas planas e paralelas de abertura constante (perfil de velocidades de Poiseuille). Como a “abertura equivalente” hidráulica calculada foi pequena ($14 \mu\text{m}$) e não corresponde à média dos valores medidos pela técnica de micro-CT ($117,21 \pm 47,40 \mu\text{m}$), o resultado da velocidade média foi muito alto dentro da fratura ($7,15 \text{ cm}\cdot\text{min}^{-1}$), adiantando em ~15 minutos o tempo de concentração de pico.

Tanto na BTC-02 (Figura 53) como na BTC-03 (Figura 54), a ADE-1D usando os valores de b_c não foi capaz de representar corretamente nenhuma característica das *breakthrough curves* (tempo e concentração de pico, formato e concentrações da cauda). O aumento da vazão (de $0,095 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ da BTC-01 para $0,238 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ na BTC-02 e para $0,331 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ na BTC-03) ocasionou um aumento de velocidade (de $7,15 \text{ cm}\cdot\text{min}^{-1}$ da BTC-01 para $20,26 \text{ cm}\cdot\text{min}^{-1}$ na BTC-03), considerado não representativo para a situação do experimento. Isso ocorre porque para uma determinada vazão dentro da fratura experimental, o gradiente hidráulico não varia inversamente com o cubo da abertura (Equação 12). As rugosidades e a presença de pontos de contato entre as paredes da fratura desviam a validade da lei cúbica (Hakami e Larsson, 1996).

O pior resultado da simulação (MSE) foi com a utilização da abertura de perda por atrito ($3,61 \leq \text{MSE} \leq 4,41$). Os valores de MSE para b_l estão próximos da faixa dos valores de MSE para b_c , no entanto, o resultado gráfico (Figura 52, Figura 53, Figura 54) mostra discrepâncias mais expressivas da ADE-1D usando b_l ao tentar capturar o formato das *breakthrough curves* medidas. Embora os valores de t_m terem sido adequados para o cálculo de b_m , o valor de b_l é muito menor que b_m (Tabela 2), ocasionando um aumento da velocidade média de escoamento. O valor de b_l não foi considerado representativo.

Figura 54 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-03) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,331 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 92% da massa injetada foi recuperada. As velocidades médias foram pré-definidas com base nas “aberturas equivalentes” e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). O tempo médio de residência do traçador foi de $\sim 4,3$ minutos. (a) escala linear e (b) escala logarítmica. Fonte: Arquivo do autor.

Apesar da simulação com abertura de balanço de massa reproduzir a concentração medida de maneira mais adequada (em comparação com as outras “aberturas equivalentes”), foi observado que a solução analítica não consegue acompanhar o formato completo (ascensão, pico e cauda) das *breakthrough curves* (Figura 52, Figura 53 e Figura 54). As diferenças entre a solução analítica e as *breakthrough curves* podem ser melhor

visualizadas nos gráficos em escala logarítmica (Figura 52b, Figura 53b e Figura 54b). O melhor ajuste da solução analítica, usando b_m , ocorreu na BTC-01 ($MSE = 1,12$), onde foi observado que a diferença entre o tempo e a concentração normalizada de pico foram, respectivamente, iguais a $\sim 1,0$ minuto (atraso) e 0,19 (Figura 53). O pior ajuste da solução analítica, usando b_m , ocorreu na BTC-02 ($MSE = 1,51$), o tempo e a concentração normalizada de pico foram, respectivamente, iguais a $\sim 1,0$ minuto e 0,04. A queda da qualidade do ajuste entre a solução analítica e as *breakthrough curves* é justificada por causa do aumento da vazão.

A ADE-1D tende a acompanhar o tempo da ascensão das *breakthrough curves* em decorrência do aumento da vazão. Para velocidades mais baixas, a ADE-1D acompanha a ascensão até o pico medido, porém o aumento da velocidade tende a desviar a solução da ADE em relação à concentração de pico. Além disso, o aumento da velocidade média de escoamento também eleva a dispersão mecânica (Equação 20) do soluto, a qual penaliza o ajuste da cauda à concentração observada. Dessa maneira, a solução analítica da ADE-1D conseguiu reproduzir satisfatoriamente o tempo e concentração de pico apenas para a vazão mais baixa ($0,095 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$; BTC-01). Essa discussão é importante porque a concentração máxima do contaminante é usualmente adotada como critério para implantação de técnicas de remediação. Embora a abertura de massa não consiga capturar o comportamento completo das *breakthrough curves*, o resultado da solução analítica pode ser considerado uma aproximação satisfatória, principalmente para a mais baixa vazão ($0,095 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$; Figura 52), porque a solução analítica empregada é unidimensional.

O resultado da simulação (ADE-1D; Genuchten, 1981) empregando a abertura mecânica, ou média, (Figura 56 e Figura 57) foi o mais satisfatório ($1,11 \leq MSE \leq 1,51$) entre os tipos de aberturas consideradas. A velocidade média ($0,80 \text{ cm} \cdot \text{min}^{-1}$) foi definida na simulação, usando o valor de b_e e a dispersividade ($\alpha_L = 0,10 \text{ cm}$) foi ajustada usando o algoritmo *search grid*.

Figura 55 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,095 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 91% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica.

Fonte: Arquivo do autor.

Figura 56 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-02) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,238 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 99% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica.

Fonte: Arquivo do autor.

Figura 57 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-03) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a $0,331 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ e $0,01 \text{ mg}$ e 92% da massa injetada foi recuperada. A velocidade média foi pré-definida com base na abertura mecânica e a dispersividade foi o parâmetro ajustável (Tabela 3). (a) escala linear e (b) escala logarítmica.

Fonte: Arquivo do autor.

Os resultados apresentados indicam que a média dos valores de abertura obtidos a partir da técnica de micro-CT e do processamento digital das imagens é adequada para descrever o transporte conservativo para vazões extremamente baixas ($0,095 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$; BTC-01). Além disso, indicam que a hipótese, de que a distribuição dos valores de

abertura, a média e a variância da amostra pequena são similares aos da amostra grande, é verdadeira.

Foram simulados três cenários incorporando o valor do desvio padrão da abertura b_e (47 μm) ao seu valor médio (Figura 58). Por exemplo, para o caso da BTC-01 o valor do MSE para $b_e = 164 \mu\text{m}$ (isto é, $117+47 \mu\text{m}$) foi de 1,51, enquanto para $b_e = 69 \mu\text{m}$ (isto é, $117-47 \mu\text{m}$) o MSE foi de 1,24.

Figura 58 – Comparação entre a *breakthrough curve* (BTC-01) e a solução analítica da ADE-1D para o transporte conservativo na fratura. A velocidade média do escoamento foi calculada considerando o desvio-padrão (47,4 μm) da média de b_e . A vazão e a massa injetada foram, respectivamente, iguais a 0,095 $\text{mL}\cdot\text{min}^{-1}$ e 0,01 mg. (a) escala linear e (b) escala logarítmica.

Fonte: Arquivo do autor.

O uso da abertura de 69 μm provoca uma antecipação do pico de concentração (Figura 58), por causa da maior velocidade de escoamento. Por outro lado, o uso da abertura mecânica de 164 μm ocasiona um atraso e diminuição na concentração de pico (Figura 58), por causa da diminuição da dispersão mecânica ($v_e \cdot \alpha_L$). Esse resultado mostra que pequenas variações no valor (constante) da abertura ocasionam mudanças significativas no transporte de solutos. Esse resultado também reforça a discussão de que a variação dos valores de abertura influencia significativamente o transporte de solutos.

A solução analítica da ADE-1D também foi utilizada para ajustar tanto a velocidade média quanto a dispersividade usando o método *search grid*. Nesse caso, por exemplo, o resultado para a BTC-01 (MSE = 1,80, velocidade média = 0,80 $\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ e $\alpha_L = 0,10$ cm) aproximou-se do resultado obtido usando a abertura mecânica, b_e .

Apesar da solução analítica ter produzido um ajuste satisfatório usando a abertura de balanço de massa e a abertura mecânica para uma vazão extremamente baixa (0,095 $\text{mL} \cdot \text{min}^{-1}$), foi observado que a solução analítica da ADE-1D não conseguiu capturar completamente a concentração de pico e, principalmente, o formato da cauda da *breakthrough curve*. A ADE tem como característica essencial a produção de dois formatos principais de curva de passagem: a primeira, apresenta tempo de pico rápido com uma cauda menos inclinada devido ao maior efeito da dispersão mecânica (veja Bear, 1979); e a segunda característica da ADE é apresentar um tempo de pico atrasado com uma cauda mais inclinada devido a diminuição da dispersão mecânica. No entanto, os resultados de concentração medidos (Figura 52, Figura 53 e Figura 54) mostraram curvas de passagem com um pico de concentração rápido com uma cauda mais inclinada, mesmo sob baixa vazão (0,095 $\text{mL} \cdot \text{min}^{-1}$; BTC-01) dentro de uma fratura muito estreita (abertura entre 100 e 200 μm). Isso ocorre porque o campo (heterogêneo) de abertura, o qual é no mínimo bidimensional (2D), provoca diferentes velocidade de transporte do traçador. O transporte de uma fração significativa do traçador é atrasado (ou retardado) por um longo período de tempo (cauda da curva de passagem) por causa de velocidades mais lentas, enquanto a outra fração de massa do traçador é transportada com maior velocidade através da fratura.

A injeção pontual do traçador realizada neste experimento através da fratura pressupõe a ocorrência de uma região com maior velocidade de escoamento de água e regiões adjacentes a esta, cuja velocidade de escoamento pode ser menor. Devido à baixa permeabilidade da matriz rochosa de basalto e a ausência de poros interconectados, foi descartada a hipótese de que a cauda abrupta e prolongada (por exemplo, Figura 57)

ocorre por causa da troca de massa entre o plano da fratura e a matriz rochosa (veja Becker e Shapiro, 2000). Embora o termo “anômalo” ser frequentemente empregado na literatura para caracterizar um transporte de solutos que não pode ser reproduzido corretamente usando a ADE, esse tipo de transporte não possui nenhuma característica aberrante (ou excepcional). Isto é, o campo de abertura, intrinsecamente 2D, simplesmente causa diferentes velocidades que não podem ser reproduzidas usando uma solução unidimensional ou até bidimensional da ADE.

Nowamooz *et al.* (2013) também observaram desvios da solução analítica da ADE em relação à cauda da curva de passagem para um traçador conservativo dentro de uma fratura. Esses autores realizaram a injeção continuamente dentro de uma única fratura com distribuição de abertura lognormal e vazão com duas ordens de magnitude superior à aplicada neste trabalho. No trabalho de Mettier *et al.* (2006), os autores concluíram que embora a solução analítica da ADE (Ogata e Banks; veja Bear 1979) tenha capturado adequadamente o tempo e a concentração de pico, a mesma falhou ao representar a cauda prolongada da *breakthrough curve*. Mettier *et al.* (2006) usaram dados de injeção de traçador (*in situ*) e uma amostra de rocha fraturada (Grimsel nos Alpes Suíços) com diâmetro de 30 cm, abertura lognormal com valores entre 0 e 1 cm para simular (simulação estocástica) o campo de abertura do domínio. Esses autores concluíram que a ADE não foi capaz de capturar o formato completo da curva de passagem porque tratava-se de um caso de transporte, usualmente chamado de “anômalo”, isto é, ocorrência de um pico de concentração rápido com uma cauda mais inclinada. Fiori e Becker (2015) mostraram que o formato “anômalo” de curvas de passagem em fraturas pode ser explicado com um modelo puramente advectivo (ausência de efeitos difusivos) e que a principal causa das caudas prolongadas é a presença de aberturas com baixa advecção.

CAPÍTULO 5

Conclusões

5. CONCLUSÃO

Um experimento de transporte de traçador conservativo em escala de laboratório foi realizado sob três diferentes vazões através de uma fratura presente em uma amostra de rocha basáltica do Aquífero Serra Geral. Os parâmetros de uma solução analítica unidimensional da Equação de Adevecção-dispersão (ADE) foram ajustados para reproduzir os valores de concentração ao longo do tempo (*breakthrough curves*) medidos.

A velocidade média do escoamento foi pré-determinada usando os valores de “abertura equivalente”. A dispersividade foi o único parâmetro ajustado para cada uma das três curvas de passagem. Os resultados mostraram que entre os tipos de “abertura equivalente” (Tsang, 1992), o melhor ajuste às *breakthrough curves* foi obtido usando a abertura de balanço de massa (b_m). A abertura de balanço de massa é a única que pode ser propriamente chamada de “abertura equivalente” para simular transporte conservativo dentro de uma fratura rugosa, isto é, com aberturas variáveis. Além disso, a similaridade entre o valor da abertura de balanço de massa e a abertura mecânica média, b_e , usando as aberturas medidas a partir da técnica de microtomografia, reforça as conclusões teóricas de Tsang (1992) e Moreno *et al.* (1988) e experimentais de Zheng *et al.* (2008).

Os resultados apresentados permitem concluir que a variação da abertura provoca impactos significantes no transporte de contaminantes. A incorporação do desvio-padrão, associado à média das aberturas (medidas), na simulação indica que a utilização de um valor constante de abertura não foi adequada para simular o transporte de contaminantes. O único e melhor ajuste obtido usando um valor constante de abertura foi a partir da abertura média, a qual é similar à abertura de balanço de massa, para uma velocidade média igual a aproximadamente $0,80 \text{ cm} \cdot \text{min}^{-1}$.

O resultado da descrição estatística dos valores de abertura medidos comprovam a hipótese de que o padrão espacial de aberturas da amostra pequena é semelhante ao da amostra grande usada no experimento com traçador. Além disso, a técnica de microtomografia computadorizada de raios-X aliada à metodologia usada no processamento digital, abre o caminho para a obtenção de valores de abertura em fraturas (até muito estreitas, com é caso deste trabalho) de amostras de basalto da Formação Serra Geral.

A ADE unidimensional não conseguiu capturar o formato completo (ascensão, pico e cauda) das curvas de passagem porque o campo de velocidade não é uniforme e

intrinsecamente bidimensional. Portanto, para realizar a simulação do transporte, deve-se incorporar a heterogeneidade da abertura da fratura. Os modelos matemáticos 2D que consideram somente a advecção e/ou a dispersão devem ser testados dentro do campo heterogêneo de aberturas para compreender a(s) causa(s) do da cauda prolongada das curvas de passagem.

Os resultados experimentais mostraram que o escoamento de água e o transporte de contaminantes pode ocorrer através de fraturas micrométricas (abertura média da ordem de 100 μm) do Aquífero Serra Geral. Portanto, caso essas fraturas micrométricas estejam conectadas entre si e/ou com fraturas subverticais e/ou subhorizontais que possuam aberturas no mínimo milimétricas, haverá risco à contaminação do ASG. Além disso, nesse contexto, devido à possível conectividade hidráulica entre o ASG e o Sistema Aquífero Guarani (SAG) (Fernandes *et al.*, 2011; Wahnfried, 2010), o SAG está susceptível à recarga subterrânea e também à contaminação proveniente (indiretamente) das fraturas micrométricas do ASG.

Portanto, as conclusões desta pesquisa finalizam a etapa inicial de contribuição para um melhor entendimento do risco à contaminação do ASG, por meio da execução de simulações computacionais de previsão, dentro de fraturas micrométricas.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ameli, P.; J. Elkhoury, E.; Detwiler, R.L. (2013). High-resolution fracture aperture mapping using optical profilometry, *Water Resources Research*, v.49, 7126-7132.
- Amundsen, H.; Wagner, G.; Oxaal, U.; Meakin, P.; Feder, J.; Jossang, T. (1999). Slow two-phase flow in artificial fractures: Experiments and simulations. *Water Resources Research*, v.35 n.9, p.2619-2626.
- Anderson, E.M. (1951). *The dynamics of faulting*. Oliver and Boyd, Edinburgh, 206p.
- Arioli, E.E. (2008). *Arquitetura faciológica da sequência vulcânica e o significado exploratório das anomalias geoquímicas de elementos do grupo da platina (egp) e metais associados no sistema magmático Serra Geral, estado do Paraná, Brasil*. Tese (Doutorado), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 195p.
- Auradou, H.; Drazer, G.; Hulin, J.-P.; Koplik, J. (2005). Permeability anisotropy induced by the shear displacement of rough fracture walls. *Water Resources Research*, v.41, n.W09423, p.1-10.
- Bandilla, K. W.; Rabideau, A. J.; Jankovic, I. (2009). A parallel mesh-free contaminant transport model based on the analytic element and streamline methods. *Advances in Water Resources*, v.32, n.8, p.1143-1153.
- Basak, P. and Rajagopalan, S. P.: Effect of non-Darcy flow on computing seawater intrusion lengths, *J. Hydrol.*, 58, 1–2, 83–87, 1982.
- Bauget, F.; Fourar, M. (2008). Non-Fickian dispersion in a single fracture. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 100, n.3-4, p.137-148.
- Bear, J. (1979). *Hydraulics of Groundwater*. EUA: Dover Publications, 592p.
- Bear, J.; Tsang, C.; de Marsily, G. (1993). *Flow and Contaminant Transport in Fracture Rock*. EUA: Academic Press, 560p.
- Becker, M.W.; Shapiro, A.M. (2000). Tracer transport in fractured crystalline rock; evidence of nondiffusive breakthrough tailing. *Water Resources Research*, v.36, n.7, p.1677-1686.
- Becker, M.W.; Shapiro, A.M. (2003). Interpreting tracer breakthrough tailing from different forced-gradient tracer experiment configurations in fractured bedrock. *Water Resources Research*, v.39, n. 1024.

Becker, M.W.; Tsoflias, G.P. (2010). Comparing flux-averaged and resident concentration in a fractured bedrock using GPR. *Water Resources Research*, v.46, n.W09518.

Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Advances in Water Resources*, v.25, n.8-12, p.861-884.

Berkowitz, B.; Cortis, A.; Dentz, M.; Scher, H. (2006). Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk. *Reviews of Geophysics*, v.44, n.RG2003.

Berkowitz, B.; Emmanuel, S.; Scher, S. (2008). Non-Fickian transport and multiple-rate mass transfer in porous media, *Water Resources Research*, v.44, n.W03402.

Berkowitz, B.; Kosakowski, G.; Margolin, G.; Scher, H. (2002). Application of continuous time random walk theory to tracer test measurements in fractured and heterogeneous porous media. *Ground Water*, v.39, n.4, p.593-604.

Bertels, S.P.; DiCarlo, D.A.; Blunt, M.J. (2001). Measurement of aperture distribution, capillary pressure, relative permeability, and in situ saturation in a rock fracture using computed tomography scanning. *Water Resources Research*, v.37, n.3, p.649-662.

Bjornberg, A. J. S.; Kutner, A. S. (1983) *Resumo das feições geológicas de interesse às fundações em rocha, em barragens da Bacia do Alto Paraná*. In: SIMPÓSIO SOBRE A GEOTECNIA DA BACIA DO ALTO PARANÁ, 1983. São Paulo. Anais, São Paulo: ABMS/ABGE/CBMR, v.1A, p. 263-297.

Bodin, J.; Delay, F.; Marsily, G. de. (2003). Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 1. fundamental mechanisms. *Journal of Hydrogeology*, v.11, n.4, p.418-433.

Boffa, J.M.; Allain, C.; Hulin, J.P. (1998). Experimental analysis of fracture rugosity in granular and compact rock. *The European Physical Journal Applied Physics*, v.2, n.3, p.281-289.

Bonnet, E.; Bour, O.; Odling, N. E.; Davy, P.; Main, I.; Cowie, P.; Berkowitz, B. (2001). Scaling of fracture systems in geological media. *Reviews of Geophysics*, v.39, n.3, p.347-383.

Boone, M.; Dewanckele, J.; Boone, M.; Cnudde, V.; Silversmit, G.; Van Ranst, E.; Jacobs, P.; Vincze, L.; Van Hoorebeke, L. (2011). Three-dimensional phase separation and identification in granite. *Geosphere*, v.7, p.79-86.

Boone, M.; Dewanckele, J.; Boone, M.; Cnudde, V.; Silversmit, G.; Van Ranst, E.; Jacobs, P.; Vincze, L.; Van Hoorebeke, L. (2011). Three-dimensional phase separation and identification in granite. *Geosphere*, v7, n.1, p.79-86.

Boutt, D. F.; Grasselli, G.; Fredrich, J. T.; Cook, B. K.; Williams, J. R. (2006). Trapping zones: the effect of fracture roughness on the directional anisotropy of fluid and colloid transport in a single rock fracture. *Geophysical Research Letters*, v.33, n.L21402.

Brown, S. R.; Caprihan, A.; Hardy, R. (1998). Experimental observation of fluid flow channels in a single fracture. *Journal Geophysics Research*, v.103, n.B3, p.5125-5132,

Brown, S. R.; Scholz, C. H. (1985). Broad bandwidth study of the topography of natural rock surfaces. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, v.90, n.B14, p.12575-12582.

Brown, S. R.; Stockman, H. W.; Reeves, S. J. (1995). Applicability of the Reynolds equation for modeling fluid flow between rough surfaces. *Geophysical Research Letters*, v.22, n.18, p.2537-2540.

Brown, S.R. (1987). Fluid flow through rock joints: the effect of surface roughness. *Journal of Geophysical Research*, v.92, n.B2, p.1337–1347.

Brown, S.R. (1989) Transport of fluid and electric current through a single fracture. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, v.94, n.B7.

Cai, Z.; Merly, C.; Thomson, N.; Wilson, R.D.; Lerner, D.N. (2007). Channel flow and trichloroethylene treatment in a partly iron-filled fracture: Experimental and model results. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.93, n.1-4, p.284-303.

Candela, T.; Renard, F.; Bouchon, M.; Brouste, A.; Marsan, D.; Schmittbuhl, J.; Voisin, C. (2009). Characterization of Fault Roughness at Various Scales: Implications of Three-Dimensional High Resolution Topography Measurements. *Pure and Applied Geophysics*, v.166, n.10, p.1817-1851.

Cardenas, M.B.; Slottke, D.T.; Ketcham, R.A.; Sharp, J.M. (2007). Navier-stokes flow and transport simulations using real fractures shows heavy tailing due to eddies. *Geophysical Research Letters*, v.34, n.14, p.1-6.

Chai, T.; Draxler, R.R. (2014). Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? – Arguments against avoiding RMSE in the literature, *Geosciences Model Development*, v.7, p.1247-1250.

Cherubini, C.; Giasi, C.I.; Pastore, N. (2012). Bench scale laboratory tests to analyze non-linear flow in fractured media. *Hydrology and Earth System Sciences*, v.16, p.2511-2522.

Cox, B.L.; Wang, J.S.Y. (1993). Fractal surfaces: Measurements and applications in the earth sciences. *Fractals*, v.1, n.1, p.87-115.

Curti, D.K. (2010). *Tipologia e origem das fraturas sub-horizontais em basaltos da Formação Serra Geral, Brasil*. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo. São Paulo.

Detwiler, R. L. (2010). Permeability alteration due to mineral dissolution in partially saturated fractures. *Journal of Geophysical Research*, v.115, n.B09210.

Detwiler, R.L.; H. Rajaram; Glass, R.J. (2009). Interphase mass transfer in variable aperture fractures: Controlling parameters and proposed constitutive relationships. *Water Resources Research*, n.45, n.W08436.

Deutsch, C.V.; Journel, A.G. (1998). *GSLIB, Geostatistical Software Library and User's Guide*. Oxford University Press, New York, second edition.

Deutsch, C.V.; Wang, L. (1996). Hierarchical object-based stochastic modeling of fluvial reservoirs. *Mathematical Geology*, v.28, n.7, p.857-880.

Dijk, P.; Berkowitz, B.; Bendel, P. (1999). Investigation of flow in water-saturated rock fractures using nuclear magnetic resonance imaging (NMRI). *Water Resources Research*, v.35, n.2, p.347-360.

Doane, D.P. (1976). Aesthetic frequency classifications. *American Statistician*, v.30, n.4, p.181-183.

Dunne, W.M.; Hancock, P.L. (1994). *Palaeostress analysis of small-scale brittle structures*. In: Hancock, P. L. Continental Deformation. Pergamon Press, U.K., p.101-120.

Durham, W.; Bonner, B.P. (1993). Peak: A new kind of surface microscope, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science*, v.30, p.699-702.

Durham, W.B.; Bonner, B.P. (1994). Self-propping and fluid flow in slightly offset joints at high effective pressures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, v.99, n.B5, p.9391-9399.

Einsiedl, F.; Maloszewski, P. (2005). Tracer tests in fractured rocks with a new florescent dye–pynere 1,3,6,8-tetra sulphonic acid (PTS). *Hydrological Sciences Journal*, v.50, n.3, p.543-554.

Endo, H. K.; Long, J.C.S.; Wilson, C.R.; Witherspoon, P.A. (1984). A model for investigating mechanical transport in fracture networks. *Water Resources Research*, v.20, n.10, p.1390–1400.

Fahim, M. A.; Wakao, N. (1982). Parameter estimation from tracer response measurements. *The Chemical Engineering Journal*, v.25, n.1, p.1-8, p.1-8.

Favretto, S. (2009). *Applications of x-ray computed microtomography to materials Science: devices and perspectives*. Alemanha:VDM Verlag Dr. Muller Aktiengesellschaft & Co. KG.

Faybishenko, B.; Benson, S.M. (2000). *Preface*, ix. In: Faybishenko, B; Witherspoon, P.A; Benson, S.M. Dynamics of fluids in fractured rock. Geophys Monogr 122, Am Geophys Union, Washington, DC.

Feldkamp, L.A.; Davis, L.C.; Kress, J.W.; (1984). Practical cone-beam algorithm. *Journal of the Optical Society of America A*, v.1, p.612-619.

Fernandes, A. J.; de Assis Negri, F.; Azevedo Sobrinho, J. M.; Varnier, C. (2012). Análise de fraturas dos basaltos do Aquífero Serra Geral e o potencial de recarga regional do Sistema Aquífero Guarani. *Boletín Geológico y Minero*, v.123, n.3, p.325-339.

Fernandes, A. J.; Maldaner, C. H.; Rouleau, A. (2011). Análise das fraturas nos basaltos de Ribeirão Preto, SP: aplicação à elaboração de modelo hidrogeológico conceitual. *Revista do Instituto de Geociências-USP*, v.11, n.3, p.42-64.

Fernandes, A.J. (2008). Aquíferos fraturados: uma revisão dos condicionantes geológicos e dos métodos de investigação. *Revista do Instituto Geológico*, v.29, n.1, p.49-72.

Fernandes, J. A.; Maldaner, C. H.; Sobrinho, J. M. A.; Pressinotti, M. N. M.; Wahnfried, I. (2010). Estratigrafia dos derrames de basaltos da Formação Serra Geral (Ribeirão Preto - SP) baseada na geologia Física, petrografia e geoquímica. *Revista do Instituto de Geociências-USP*, v.10, n.2, p.73-99.

Fiori, A.; Becker, M. (2015). Power law breakthrough curve tailing in a fracture: The role of advection. *Journal of Hydrology*, v.525, p.706-710.

Fiume, B. (2013). *Geologia estrutural de detalhe para elaboração de modelo conceitual de circulação de água subterrânea: estudo de caso em Jurubatuba, SP*. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo. São Paulo.

Fossen, H. Structural geology. 2010. Reino Unido: Cambridge University, 463 p.

Furuie, R.A. (2009). *Estudo comparativo de métodos geoestatísticos de estimativas e simulações estocásticas condicionais*. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, São Paulo.

Gentier, S. (1987). Comportement hydromecanique d'une fracture naturelle SODS conllllinte nonnale. *Proc ISRM 6th InL Congr on Rock Mechanics*. Montreal. Canada. v.I, p.105-108.

Gentier, S. (1990). Morphological analysis of a natural fracture. *Selected papers from 28th Int Geological Congress*. Washington. D.C. Hydrogeology, v.I, p.315-326.

Gentier, S.; Billaux, D.; van Vliet, L. (1989) Laboratory testing of voids of a fracture. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, v.22, n.2, p.149-57.

Giacomini, A.; Buzzi, O.; Ferrero, A.; Migliazza, M.; Giani, G. (2008). Numerical study of flow anisotropy within a single natural rock joint. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science*, v.45, n.1, p.47-58.

Giwelli, A.; Sakaguchi, K.; Matsuki, K. (2009). Experimental study of the effect of fracture size on closure behavior of a tensile fracture under normal stress. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, v.46, p.462-470.

Gómez-Hernández, J.J. Geostatistics. In: Rubim, Y.; Hubbard, S. *Hydrogeophysics*. Springer Netherlands, v.50, cap.2, p.59-83, 2005.

Gómez-Hernández, J.J.; Cassiraga, E.F. (1994). *Theory and practice of sequential simulation*. In M. Armstrong and P. Dowd, editors, *Geostatistical Simulations*, p.111-124. Kluwer Academic Publishers.

Gómez-Hernández, J.J.; Journel, A.G. (1993). *Joint simulation of multiGaussian random variables*. In Amilcar Soares, editor, *Geostatistics Tróia '92*, v.1, p.85-94. Kluwer Academic Publishers.

Gómez-Hernández, J.J.; Srivastava, R. M. (1990). ISIM3D: An ANSI-C three dimensional multiple indicator conditional simulation program. *Computer and Geosciences*, v.16, n.4, p.395-440.

Gómez-Hernández, J.J.; Wen, X.-H. (1998). To be or not to be multiGaussian: A reflection in stochastic hydrogeology. *Advances in Water Resources*, v.21, n.1, p.47-61.

Gonzalez, R.C.; Woods, R.E. (2000). *Digital Image Processing*. Englewood Cliffs, 2edition, 793p.

Gouze, P.; Noiriél, C.; Bruderer, C.; Loggia, D.; Leprovost, R. (2003). X-ray tomography characterization of fracture surfaces during dissolution. *Geophysical Research Letters*, v.30, n.5, p.71-74.

Gualda, G.A.R.; Rivers, M. (2006). Quantitative 3D petrography using X-ray tomography: Application to Bishop Tuff pumice clasts. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v.154, p.48-62,

Guidicini G.; Campos J.O. (1968). Notas sobre a morfogênese dos derrames basálticos. *Boletim da Sociedade Brasileira de Geologia*, v.17, p.15-28.

Gupta, H.V.; Kling, H.; Yilmaz, K.K; Martinez, G.F. (2009). Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology*, v.377, n.1-2, p.80-91.

Haggerty, R.; Gorelick, S.M. (1995). Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity. *Water Resources Research*, v.31, n.10, p.2383-2400.

Hakami, E.; Einstein, H.H., Gentier, S.; Iwano, M. (1995). Characterization of Fracture Apertures - Methods and Parameters. *International Society for Rock Mechanics. 8th ISRM Congress*, 25-29 September, Tokyo, Japan.

Hakami, E.; Larsson, E. (1996). Aperture measurements and flow experiments on a single natural fracture. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts*, v.33, n.4, p.395-404.

Hakami, E.; Stephansson, O. (1993). Experimental technique for aperture studies of intersecting joints. *Proc ISRM InL Symp Eurock 93*. Lisbon, p.301-308.

Hasan, M.K.; Sadi, F.; Lee, S.Y. (2010). Removal of ring artifacts in micro-CT imaging using iterative morphological filters. *Sinal, Image and Video Processing*, v.6, n.1, p.41-53.

Hirono, T.; Takahashi, M.; Nakashima, S. (2003). In situ visualization of fluid flow image within deformed rock by x-ray CT. *Engineering Geology*, v.70, n.1-2, p.37-46.

Hjerne, C.; Nordqvist, R. (2014). Relation between mass balance aperture and hydraulic properties from field experiments in fractured rock in Sweden. *Hydrogeology Journal*, v.22, p.1285-1292.

Hoehn, E.; Eikenberg, J.; Fierz, T.; Drost, W.; Reichlmayr, E. (1998). The Grimsel Migration Experiment: field injection-withdrawal experiments in fractured rock with sorbing tracers. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.34, p.85-106.

Huber, F.; Enzmann, F.; Wenka, A.; Bouby, M.; Dentz, M.; Schäfer, T. (2012). Natural microscale heterogeneity induced solute and nanoparticle retardation in fractured crystalline rock. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.133, n.0, p.40-52.

Ing, T.C.; Xiayan, N. (2002). Coupled consolidation theory with non-Darcian flow, *Computers and Geotechnics*, v.29, n.3, p.169-209.

Iritani, M.; Sibeles, E. (2008). *As Águas subterrâneas do Estado de São Paulo*. Secretaria do Meio Ambiente e Instituto Geológico, 104p.

Isaaks, E. H.; Srivastava, R.M. (1989). *An introduction to Applied Geostatistics*, Oxford University Press, 592p.

Isakov, E.; Ogilvie, S.R.; Taylor, C.W.; Glover, P.W.J. (2001). Fluid flow through rough fractures in rocks I: high-resolution aperture determinations. *Earth and Planetary Science Letters*, v.191, n.3-4, p.267-82.

Ishibashi, T.; Watanabe, N.; Hirano, N.; Okamoto, A.; Tsuchiya, N. (2015). Beyond-laboratory-scale prediction for channeling flows through subsurface rock fractures with heterogeneous aperture distributions revealed by laboratory evaluation. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, v.120, p.106-124.

Journel, A.G. (1989). *Fundamentals of Geostatistics in Five Lessons*. Short Courses in Geology, v.8, American Geophysical Union.

Journel, A.G.; Huijbregts, J.C.H. (1978). *Mining geostatistics*. New York: Academic Press, 600p.

Kak, A.C.; Slaney, M. (1987). *Principles of computed tomography imaging*, EUA: IEEE PRESS, 327p.

Kang, P.K.; Le Borgne, T.; Dentz, M.; Bour, O.; Juanes, R. (2015). Impact of velocity correlation and distribution on transport in fractured media: Field evidence and theoretical model. *Water Resources Research*, v.51, p.940-959.

Karpyn, Z.T.; Grader, A.S.; Halleck, P.M. (2007). Visualization of fluid occupancy in a rough fracture using micro-tomography. *Journal of Colloid and Interface Science*, v.307, p.181-187.

Keller, A.A.; Roberts, P.V.; Blunt, M.J. (1999). Effect of fracture aperture variations on the dispersion of contaminants. *Water Resources Research*, v.35, n.1, p.55-63.

Keller, A.A.; Roberts, P.V.; Kitanidis, P.K. (1995). Prediction of single phase transport parameters in a variable aperture fracture. *Geophysical Research Letters*, v. 22, n.11, p.1425-1428.

Ketcham, R.A.; Carlson, W.D. (2001). Acquisition, optimization and interpretation of x-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. *Computers Geosciences*, v.27 n.4, p.381-400.

Ketcham, R.A.; Iturrino, G.J. (2005). Nondestructive high-resolution visualization and measurement of anisotropic effective porosity in complex lithologies using high-resolution X-ray computed tomography. *Journal of Hydrology*, v.302, p.92-106.

Ketcham, R.A.; Slottke, D.T.; Sharp, J.M. (2010). Three-dimensional measurement of fractures in heterogeneous materials using high-resolution x-ray computed tomography. *Geosphere*, v.6, n.5, p.499-514.

Kitanidis, P.K. (1997). *Introduction to Geostatistics: Applications in Hydrogeology*. Cambridge University Press, Cambridge, MA, EUA, 249p.

Kitanidis, P.K. Particle tracking equations for the solution of the advection dispersion equation with variable coefficients. *Water Resources Research*, v.30, n.11, p.3225–3227.

Koltermann, C.E.; Gorelick, S.M. (1996). Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. *Water Resources Research*, v.32, n.9, p.2617-2658.

Konikow, L.F.; Bredehoeft, J.D. (1978). Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. *USGS Water Resources Investigations*, Book 7, Chapter C2.

Kosakowski, G. (2004). Anomalous transport of colloids and solutes in a shear zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.72, n.1-4, p.23-46.

Kyle, R.; Ketcham, R. (2015). Application of high resolution X-ray computed tomography to mineral deposit origin, evaluation, and processing. *Ore Geology Reviews*, v.65, n.4, p.821-839.

Larsson, M.; Odén, M.; Niemi, A.; Neretnieks, I.; Tsang, C.-F. (2013). A new approach to account for fracture aperture variability when modeling solute transport in fracture networks. *Water Resources Research*, v.49, p.2241-2252.

Lawn, B.R.; Wilshaw, T.R. (1975). *Fracture of brittle solids*. Cambridge University Press, Cambridge, 204 p.

Le Bas, M.J.; Le Maitre, R.W.; Streckeisen, A.; Zanettin, B.A. (1986) Chemical classification of volcanic rocks based on the total alkali-silica diagram. *Journal of Petrology*, v.27, n.3, p.745-750.

Lee, J.; Kang, J.M.; Choe, J. (2003). Experimental analysis on the effects of variable apertures on tracer transport, *Water Resources Research*, v.39, n.1015, p.1-11.

Lee, S.H.; Lee, K.-K.; Yeo, I.W. (2014). Assessment of the validity of Stokes and Reynolds equations for fluid flow through a rough-walled fracture with flow imaging. *Geophysical Research Letters*, v.41, p.4578–4585.

Leinz, V.; Bartorelli A.; Sadowski, G.R.; Isotta, C.A.L. (1966). Sobre o comportamento espacial do trapp basáltico da Bacia do Paraná. *Boletim da Sociedade Brasileira de Geologia*, v.15, p.79-91.

Liu, L.; Neretnieks, I. (2006). Analysis of fluid flow and solute transport through a single fracture with variable apertures intersecting a canister: Comparison between fractal and Gaussian fractures. *Physics and Chemistry of the Earth*, v.31, p.634-639.

Long, J.C.S.; Witherspoon, P.A. (1986). The relationship of the degree of interconnection to permeability in fracture networks. *Journal Geophysics Research*, v.90, n.B4, p.3087-3098.

Machado, F.B.; Nardy, A.J.R.; Melo, R.P.; de Oliveira, M.A.F.; Squisato, E. (2005). As rochas intrusivas da Formação Serra Geral na Porção leste da Bacia do Paraná no Estado de São Paulo: Aspectos petrográficos e geoquímicos - Resultados preliminares. *Geociências*, v.24, n.1, p.5-17.

Magal, E.; Weisbrod, N.; Yakirevich, A.; Yechieli, Y. (2008). The use of fluorescent dyes as tracers in high saline groundwater. *Journal of Hydrology*, v.358, n.1-2, p.124-133.

Maloszewski, P.; Zuber, A. (1993). Tracer experiments in fractured rocks: Matrix diffusion and the validity of models. *Water Resources Research*, v.29, n.8, p.2723–2735.

Marques, L.S.; Ernesto, M. (2004). *O magmatismo toleítico da Bacia do Paraná*. In: Mantesso Neto, V.; Bartorelli, A.; Carneiro, C.D.R.; Brito Neves, B. (eds.). *Geologia do continente sul-americano: Evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida*. Beca, São Paulo, p. 245-263.

Marrett, R. (1996). Aggregate properties of fracture populations. Special issue: Scaling laws for fault and fracture populations; analyses and applications: *Journal of Structural Geology*, v.18, n.2-3, p.169-178.

Marsily, G. de. (1986). *Quantitative Hydrogeology*. EUA: Academic Press, 440p.

Matheron, G. (1965). *Les variables régionalisées et leur estimation*. Paris: Masson, 306p.

Matheron, G. (1967). *Elements Pour une Theorie des Milieux Poreux*. Masson, Paris, 168p.

Matsuki, K.; Chida, Y.; Sakaguchi, K.; Glover, P.W.J. (2006). Size effect on aperture and permeability of a fracture as estimated in large synthetic fractures. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v.43, n.726.

Méheust, Y.; Schmittbuhl, J. (2001). Geometrical heterogeneities and permeability anisotropy of rough fractures. *Journal of Geophysical Research*, v.106, n.B2, p.2089-2102.

Mettier, R.; Kosakowski, G.; Kolditz, O. (2006), Influence of Small-Scale Heterogeneities on Contaminant Transport in Fractured Crystalline Rock. *Ground Water*, v.44, p.687-696.

Milani, E. J. (2004). *Comentários sobre a origem e evolução tectônica da Bacia do Paraná*. In: Mantesso Neto, V.; Bartorelli, A.; Carneiro, A.D.R.; Brito-Neves, B.B. (Ed.) *Geologia do Continente Sul-Americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida*. São Paulo: Beca, p.265-279.

Militky, J.; Kovacic, V.; Rubnerová, J. (2002). Influence of Thermal Treatment on Tensile Failure of Basalt Fibers. *Engineering Fracture Mechanics*, v.69, p.1025-1033.

Mocellin, R.C; Ferreira, F.J.F. (2009). Conectividade e compartimentação dos sistemas aquíferos Serra Geral e Guarani no sudoeste do estado do Paraná, Brasil. *Revista Brasileira de Geociências-USP*, v.39, n.3, p.567-579.

Montemagno, C.D.; Pyrak-Nolte, L.J. (1999). Fracture network versus single fractures: measurement of fracture geometry with X-ray tomography. *Physics and Chemistry of the Earth*, v.24, n.7, p.575-579.

Naurath, L.; Weidner, C.; Rude, T. R.; Banning, A. (2011). A new approach to quantify Na-Fluorescein (Uranine) in acid mine waters. *Mine Water and the Environmental*, v.30, n.3, p.231-236.

Neuman, S.P. (1987). *Stochastic continuum representation of fractured rock permeability as an alternative to the REV and fracture network concepts*. In: Custodio, E.; Gurgui, A.; Ferreira, J. (eds). *Groundwater Flow and Quality Modelling*, 224 de NATO ASI Series, Springer Netherlands, p.331-362

Neuman, S.P. (2008). Multiscale relationship between fracture length, aperture, density and permeability. *Geophysical Research Letters*, v.35, n.L22402, p.1-6.

Neuman, S. P. (2005). Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fracture rocks. *Hydrogeology Journal*, v.13, n.1, p.124-147.

Neuweiler, I.; Sorensen, I.; Kinzelbach, W. Experimental and theoretical investigations of drainage in horizontal rough-walled fractures with different correlation structures. *Advances in Water Resources*, v.27, n.12, p.1217-1231.

Noiriel, C.; Gouze, P.; Madé, B. (2013). 3D analysis of geometry and flow changes in a limestone fracture during dissolution. *Journal of Hydrology*, v.486, n.0, p.211-223.

Novakowski, K.S.; Bogan, J.D. (1999). A semi-analytical model for the simulation of solute transport in a network of fractures having random orientations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, v.23, n.4, p.317-333.

Nowamooz, A.; Radilla, G.; Fourar, M.; Berkowitz, B. (2013). Non-fickian transport in transparent replicas of rough-walled rock fractures. *Transport in Porous Media*, v.98, n.3, p.651-682.

Odling, N.E. (1994). Natural fracture profiles, fractal dimension and joint roughness coefficients. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, v.27, n.3, p.135-153.

Oron, A.P.; Berkowitz B. (1998). Flow in fractures: the local cubic law assumption reexamined. *Water Resources Research*, v.34, n.11, p.2811-25.

Ortega, O.J.; Marrett, R.A.; Laubach, S.E. (2006). A scale-independent approach to fracture intensity and average spacing measurement. *AAPG Bulletin*, v.90, n.2, p.193-208.

Peacock, D.C.P.; Harris, S.D.; Mauldon, M. (2003). Use of curved scanlines and boreholes to predict fracture frequencies. *Journal of Structural Geology*, v.25, p.109-119.

Pitas, I.; Venetsanopoulos, A.N. (1990). *Nonlinear Digital Filters: Principles and Applications*. Kluwer Academic Publisher, Boston, 392p.

Polak, A.; Elsworth, D.; Liu, J.; Grader, A.S. (2004). Spontaneous switching of permeability changes in a limestone fracture with net dissolution. *Water Resources Research*, v.40, n.W03502.

Ponson, L.; Auradou, H.; Vié, P.; Pessel, M.; Lazarus, V.; Hulin, J.P. (2007). Failure mechanisms and surface roughness statistics of fractured Fontainebleau sandstone *Physical Review E*, v.76, n.3, p.1-7.

Poon, C.Y.; Sayles, R.S.; Jones, T.A. (1992). Surface measurement and fractal characterization of naturally fractured rocks. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v.25, n.8, p.1-8.

Potsch, C. (1954). *Mineralogia e Geologia*, Ed. Livraria Francisco Alves, Rio de Janeiro.

Price, N.J.; Cosgrove, J.W. (1990). *Analysis of geological structures*. Cambridge University Press, Cambridge, 502 p.

Priest, S.D.; Hudson, J.A. (1981). Estimation of discontinuity spacing and trace length using scanline surveys. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, v18, p.183-197.

Ptak, T.; Piepenbrink, M.; Martac, E. (2004). Tracer tests for the investigation of heterogeneous porous media and stochastic modeling of flow and transport – a review of some recent developments. *Journal of Hydrology*, v.294, p.22-163.

Renard, F.; Schmittbuhl, J.; Gratier, J.-P.; Meakin, P.; Merino, E. (2004). Three-dimensional roughness of stylolites in limestones. *Journal of Geophysical Research*, v.109, n.B03209.

Renshaw, C.E.; Dadakis, J.S.; Brown, R. (2004). Measuring fracture apertures: a comparison of methods. *Geophysical Research Letters*, v.27, n.2, p.289-292.

Rodrigues, S.N.; Dickson, S.E.; Qu, J. (2013). Colloid retention mechanisms in single, saturated, variable-aperture fractures. *Water Research*, v.47, p.31-42.

Sanford, W.E.; Shropshire, R.G.; Solomon, D. (1996). Dissolved gas tracers in groundwater: Simplified injection sampling and analysis. *Water Resources Research*, v.32, n.6, p.1635-1642.

Santos; Pereira, C. (2004). *A técnica de amostragem linear: aplicação ao estudo geotécnico e geomecânico do maciço granítico da pedreira da Mimosa (Cabeça Santa, Penafiel)*, Relatório de Projeto/Estágio inédito, Dep. Eng. Geotécnica, ISEP, p.47.

Schmittbuhl, J.; Schmitt, F.; Scholz, C. (1995). Scaling invariance of crack surfaces. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, v.100, n.B4, p.5953-5973.

Schmittbuhl, J.; Steyer, A.; Jouniaux, L.; Toussaint, R. (2008). Fracture morphology and viscous transport. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v.5, n.3, p.422-430.

Snow, D.T. (1965). *A parallel plate model of permeable fracture media*. EUA: PhD Thesis, University of California.

Soares, A. (2001). Direct sequential simulation and cosimulation. *Mathematical Geology*, v.33, n.8, p.911-926.

Stockman, H.W.; Johnson, J.; Brown, S.R. (2001). Mixing at fracture intersections: Influence of channel geometry and the Reynolds and Peclet numbers. *Geophysical Research Letters*, v.28, p.4299-4302.

Szulczewski, M. L.; MacMinn, C. W.; Herzog, H.J.; Juanes, R. (2012). Lifetime of carbon capture and storage as a climate-change mitigation technology. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v.109, n.14, p.5185-5189.

Tang, D.H.; Frind, E.O.; Sudicky, E. A. (1981). Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solution for a single fracture. *Water Resources Research*, v.17, n.3, p.555-564.

Tang, X-Yu.; Weisbrod, N. (2009). Colloid-facilitated transport of lead in natural discrete fractures. *Environmental Pollution*, v.157, p.2266-2274.

Tenchine, S.; Gouze, P. (2005). Density contrast effects on tracer dispersion in variable aperture fractures. *Advances in Water Resources*, v.28, n.3, p.273-289.

Tsang Y. W.; Tsang, C. F. (1987). Channel model f flow through fractured media. *Water Resources Research*, v.23, n.3, p.467-479.

Tzelepis, V.; Moutsopoulos, K.N.; Papaspyros, J.N.E.; Tsihrintzis, V.A. (2015). Experimental investigation of flow behavior in smooth and rough artificial fractures. *Journal of Hydrology*, v.521, p.108-118.

Vaz, C.M.P.; de Maria, I.C.; Lasso, P.O.; Tuller, M. (2011). Evaluation of an Advanced Benchtop Micro-Computed Tomography System for Quantifying Porosities and Pore-Size Distributions of Two Brazilian Oxisols. *Soil Science Society of America Journal*, v.75, n.3, p.832-841.

Vaz, C.M.P.; Tuller, M.; Lasso, P.R.O.; Crestana, S. (2014). *New perspectives for the application of high-resolution benchtop X-ray microCT for quantifying void, solid and liquid phases in soils*. In: W.G. Teixeira *et al.* (eds.), *Application of Soil Physics in Environmental Analyses: Measuring, Modelling and Data Integration*, Progress in Soil Science, Springer International Publishing Switzerland.

Viana, C.D. (2015). *Análise estrutural de descontinuidades baseada em técnicas de structure from motion: aplicação em mina a céu aberto*. Dissertação (Mestrado), Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 158p.

Vickers, B.C; Neuman, S.P.; Sully, M.J.; Evans, D.D. (1992). Reconstruction and geostatistical analysis of multiscale fracture apertures in a large block of welded tuff. *Geophysical Research Letters*, v.19, n.10, p.1029-1032.

Vilarassa, V.; Koyama, T.; Neretnieks, I.; Jing, L. (2010). Shear-Induced Flow Channels in a Single Rock Fracture and Their Effect on Solute Transport. *Transport Porous Media*, v.87, n.2, p.503-523.

Voorn, M.; Exner, U.; Rath, A. (2013). Multiscale Hessian fracture filtering for the enhancement and segmentation of narrow fractures in 3D image data. *Computers & Geosciences*, v.57, p.44-53.

Wackernagel, H. (2003). *Multivariate geostatistics: an introduction with applications*. 3ed. Springer-Verlag, 403p.

Wahnfried, I. (2010). Estratigrafia dos derrames de basaltos da Formação Serra Geral (Ribeirão Preto - SP) baseada na geologia Física, petrografia e geoquímica. *Revista do Instituto de Geociências-USP*, v.10, n.2, p.73-99.

Wang, L.; Cardenas, M.B. (2014). Non-Fickian transport through two-dimensional rough fractures: Assessment and prediction. *Water Resources Research*, v.50, n.2, p.871-884.

Watanabe, N.; Hirano, N.; Tsuchiya, N. (2008). Determination of aperture structure and fluid flow in a rock fracture by high-resolution numerical modeling on the basis of a flow-through experiment under confining pressure. *Water Resources Research*, n.44, n.W06412.

Watanabe, N.; Ishibashi, T.; Ohsaki, Y.; Tsuchiya, Y.; Tamagawa, T.; Hirano, N.; Okabe, H.; Tsuchiya, N. (2011). X-ray CT based numerical analysis of fracture flow for core samples under various confining pressures. *Engineering Geology*, v.123, n.4, p.338-346.

Wen, X.-H.; Gómez-Hernández, J. J. (1998). Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media: A comparison of multi-Gaussian and non-multi-Gaussian models. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.30, p.129-156.

Wendland, E.; Himmelsbach, T. (2002). Transport simulation with stochastic aperture for a single fracture: A comparison with a laboratory experiment. *Advances in Water Resources*, v.25, n.1, p.19-32.

Willmann, M.; Carrera, J.; Sanchez-Vila, X. (2008). Transport upscaling in heterogeneous aquifers: what physical parameters control memory functions?. *Water Resources Research*, v.44, n.W12437.

Witherspoon, P.A.; Wang, J.S.Y.; Iwai, K.; Gale, J.E. (1980). Validity of cubic law for fluid flow in a deformable rock fracture. *Water Resources Research*, v.16, n.6, p.1016-1024.

Yamamoto, J.K.; Landim, P.M.B. (2009). *Geoestatística: conceitos e aplicações*. São Paulo: Oficina de Textos, 215p.

Zeng, Z.; Grigg, R. (2006). A criterion for non-darcy flow in porous media. *Transport in Porous Media*, v.63, n.1, p.57-69.

Zheng, Q.; Dickson, S.; Guo, Y. (2009). Influence of aperture field heterogeneity and anisotropy on dispersion regimes and dispersivity in single fractures. *Journal of Geophysical Research*, v.114, n. B03205, p.1-12.

Zheng, Q.; Dickson, S.E.; Guo, Y. (2008). On the appropriate “equivalent aperture” for the description of solute transport in single fractures: Laboratory-scale experiments. *Water Resources Research*, v.44, n.W04502.

Zhu, W.C.; Liu, J.; Elsworth, D.; Polak, A.; Grader, A.; Shen, J.C.; Liu, J.X. (2007). Tracer transport in a fractured chalk: X-ray CT characterization and digital-image-based (DIB) simulation. *Transport in Porous Media*, v.70, n.25-42.

Zimmerman, R. W.; Bodvarsson, G.S. (1996). Hydraulic conductivity of rock fractures. *Transport in Porous Media*, v.23, n.1, p.1-30.

Zimmerman, R. W.; Yeo, I.-W. (2000). *Fluid flow in rock fractures: From the Navier-Stokes equations to the cubic law*, in *Dynamics of Fluids in Fractured Rock*, Geophys. Monogr. Ser., vol. 122, edited by B. Faybishenko, P. A. Witherspoon, and S. M. Benson, pp. 213–224, AGU, Washington, D. C.

Zvikelsky, O.; Weisbrod, N. (2006). Impact of particle size on colloid transport in discrete fractures. *Water Resources Research*, v.42, n.W12S08.

7. ANEXOS

ANEXO I

Desenvolvimento matemático da Lei Cúbica para escoamento em fratura

A “abertura equivalente” hidráulica é originada a partir da Lei Cúbica (Witherspoon *et al.*, 1980). A Lei Cúbica é resultante de simplificações realizadas a partir das equações de Navier-Stokes, N-S (Batchelor, 1967):

$$\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla h \rho \mathbf{g}$$

Equação I.1

Onde, ρ [M.L^{-3}] é a massa específica do fluido; $\mathbf{v}$ [L.T^{-1}] é o vetor velocidade de escoamento do fluido; $\mathbf{g}$ [L.T^{-2}] é o vetor de aceleração da gravidade. O termo inercial do lado esquerdo da Equação é o que garante a não linearidade das equações de N-S. O primeiro termo do lado direito representa as forças viscosas. Para o escoamento tridimensional, a Equação é escrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \rho \cdot \left(v_x \cdot \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) &= \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) - \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial x} \\ \rho \cdot \left(v_x \cdot \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) &= \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) - \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial y} \\ \rho \cdot \left(v_x \cdot \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) - \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial z} \end{aligned}$$

Equação I.2

Negligenciando os termos inerciais, as forças viscosas devem possuir magnitude (*mag*) suficiente para amortecer qualquer perturbação no campo de escoamento laminar linear (Zimmerman e Yeo, 2000):

$$\text{mag} \left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \gg \text{mag} \left(\rho \cdot v_x \cdot \frac{\partial v_x}{\partial x}, \rho \cdot v_y \cdot \frac{\partial v_x}{\partial z}, \rho \cdot v_z \cdot \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)$$

$$\text{mag}\left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2}\right) \gg \text{mag}\left(\rho \cdot v_x \cdot \frac{\partial v_y}{\partial x}, \rho \cdot v_y \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z}, \rho \cdot v_z \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z}\right)$$

$$\text{mag}\left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2}\right) \gg \text{mag}\left(\rho \cdot v_x \cdot \frac{\partial v_y}{\partial x}, \rho \cdot v_y \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z}, \rho \cdot v_z \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z}\right)$$

Equação I.3

De acordo com a Equação , as equações de N-S podem ser linearizadas para as chamadas equações de Stokes:

$$\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial y}$$

$$\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial z}$$

Equação I.4

As equações de Stokes podem ainda ser simplificadas caso seja aceita a hipótese de que a derivada parcial de segunda ordem de v_z na direção z seja desprezível e também que v_x e v_y na direção z dominem as outras forças viscosas da Equação . Essa hipótese é válida para variações graduais de abertura nas direções x e y . As equações de Stokes simplificadas podem ser escritas como (Zimmerman e Bodvarsson, 1996):

$$\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial y}$$

Equação I.5

O lado direito da Equação não depende da direção z , então, as equações podem ser integradas em relação aos respectivos z e considerando válida a condição de não deslizamento nas paredes da fratura, $z = b_1$ e $z = -b_2$ (Figura 8), vem:

$$v_x(x, y, z) = \frac{1}{2\eta} \cdot \rho g \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \cdot (z - b_1) \cdot (z + b_2)$$

$$v_y(x, y, z) = \frac{1}{2\eta} \cdot \rho g \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \cdot (z - b_1) \cdot (z + b_2)$$

Equação I.6

Esse é essencialmente o mesmo perfil parabólico de velocidades para o caso de uma abertura constante (placas planas paralelas) ao longo de todo o comprimento da fratura, exceto pelo fato de que a velocidade é paralela ao gradiente de pressão local, o qual não é necessariamente alinhado ao gradiente global de pressão. A integração da Equação sobre a direção z somada resulta em:

$$v_x = \frac{1}{b} \cdot \int_{-h_2}^{b_1} \rho g \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \cdot (z - b_1) \cdot (z + b_2) dz = - \left(\frac{\rho \cdot g \cdot b^2(x, y)}{12 \cdot \eta} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right)$$

$$v_y = \frac{1}{b} \cdot \int_{-h_2}^{b_1} \rho g \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \cdot (z - b_1) \cdot (z + b_2) dz = - \left(\frac{\rho \cdot g \cdot b^2(x, y)}{12 \cdot \eta} \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right)$$

Equação I.7

A Equação satisfaz as equação de conservação de momento, porém contém um campo de carga hidráulica (ou de pressão) desconhecido ($h(x, y)$). A pressão deve ser encontrada por meio de alguma forma da equação da continuidade. Então, aplicando-se a equação da continuidade ao escoamento local, a Equação adquire a forma da chamada equação de Reynolds (bidimensional) (Zimmerman e Bodvarsson, 1996):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho \cdot g \cdot b^3(x)}{12 \cdot \eta} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho \cdot g \cdot b^3(y)}{12 \cdot \eta} \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0$$

Equação I.8

A equação de Reynolds é chamada de lei cúbica local (*local cubic law*, LCL) em que a taxa de escoamento é analisada localmente (Oron e Berkowitz, 1998). A variação abrupta da abertura causa um aumento maior na magnitude de $\partial^2 v_x / \partial x^2$ e $\partial^2 v_y / \partial y^2$ em

comparação com $\partial^2 v_x / \partial z^2$ e $\partial^2 v_y / \partial z^2$, tornando não verdadeira a hipótese estabelecida na Equação . A Equação pode ser reescrita usando o divergente (*div*):

$$\text{div} \left(\frac{\rho \cdot g}{\eta} \cdot \frac{b^3(x, y)}{12} \cdot \nabla h \right) = 0$$

Equação I.9

A solução para o escoamento total macroscópico, Q [$L^3 \cdot T^{-1}$], através de toda a fratura é dado pela introdução da dimensão transversal da fratura, H [L], (Figura 16) em relação à direção do escoamento:

$$Q = - \frac{\rho \cdot g}{\eta} \cdot \frac{b^3}{12} \cdot H \cdot \nabla h$$

Equação I.10

A Equação é a representação matemática do escoamento macroscópico entre placas planas paralelas, a qual consiste na única forma (simplificada) de resolver as equações de Navier-Stokes, pressupondo um valor constante de abertura para a fratura.

Em um meio poroso homogêneo e isotrópico, a descarga específica, q [$L^3 \cdot T^{-1} \cdot M^{-2}$], é expressa pela equação de Darcy (Bear, 1979):

$$q = \frac{Q}{b \cdot H}$$

$$q = - \frac{\rho \cdot g}{\eta} \cdot k \cdot \nabla h$$

Equação I.11

Onde, k [L^2] é a permeabilidade intrínseca do meio. A condutividade hidráulica, K [$L \cdot T^{-1}$], é a razão $k \cdot \rho \cdot g / \eta$. Admitindo uma fratura definida por placas planas paralelas, sob pressão constante através de sua abertura e negligenciando o atrito, k pode ser aproximado por (Bear *et al.*, 1993):

$$k = \frac{b^2}{12}$$

Equação I.12

ANEXO II

Conversão da medida de absorbância em concentração

Figura II – Reta de calibração para a conversão de absorbância em concentração do traçador fluorescente. Fonte: Arquivo do autor.

ANEXO III

Calibração da bomba peristáltica

Figura III – Reta de calibração para a vazão da bomba peristáltica. Fonte: Arquivo do autor.

ANEXO IV

Curvas de recuperação do traçador

Figura IV.1 – Curva de recuperação de massa do traçador para a BTC-01.

Fonte: Arquivo do autor.

Figura IV.2 – Curva de recuperação de massa do traçador para a BTC-02.

Fonte: Arquivo do autor.

Figura IV.3 – Curva de recuperação de massa do traçador para a BTC-02.

Fonte: Arquivo do autor.

ANEXO V

Inventário fotográfico do trabalho de campo

Figura V.1 – Perfuração de amostras pequenas de basalto fraturado utilizando uma broca de coroa diamantada acoplada a uma perfuratriz manual. Fonte: Arquivo do autor.

Figura V.2 – Detalhe do amostrador de pequenas amostras de basalto fraturado
Fonte: Arquivo do autor.

Figura V.3 – Bloco de rocha usado para coleta e extração das amostras pequenas e grandes. As amostras foram retiradas do mesmo plano de fratura. Detalhe para o escoamento de água dentro das fraturas micrométricas. Fonte: Arquivo do autor.

Figura V.4 – Amostra grande de basalto com uma placa de anel metálico (espessura = 1,0 mm) para assentamento do *o-ring* de vedação no orifício de entrada e saída de água.

Fonte: Arquivo do autor.

Figura V.5 – Retificação da amostra (cilíndrica) grande de basalto fraturado. A água limpa da caixa-d'água foi utilizada na serra de corte. Fonte: Arquivo do autor.

Figura V.6 – Amostra grande de basalto fraturado após a retificação. A água limpa da caixa-d'água foi utilizada na serra de corte. Fonte: Arquivo do autor.