

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Engenharia de São Carlos

Integração de imagem micro-CT com a
Geoestatística Multi-ponto para modelagem
do escoamento em fratura pelo Método dos
Elementos Analíticos

Hélio Correia da Silva Jhunior
Orientador: Prof. Tit. Edson Cezar
Wendland

HÉLIO CORREIA DA SILVA JHUNIOR

**Integração de imagem micro-CT com a Geoestatística Multiponto
para modelagem do escoamento em fratura pelo Método dos
Elementos Analíticos**

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

2023

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

C824i Correia da Silva Jhuniór, Hélio
Integração de imagem micro-CT com a
Geoestatística Multiponto para modelagem do escoamento
em fratura pelo Método dos Elementos Analíticos / Hélio
Correia da Silva Jhuniór; orientador Edson Cezar
Wendland. São Carlos, 2023.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Hidráulica e Saneamento e Área de
Concentração em Hidráulica e Saneamento -- Escola de
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo,
2023.

1. Método dos Elementos Analíticos. 2.
Geoestatística Multiponto. 3. Imagem micro-CT. 4.
Fratura. 5. Curva de passagem. I. Título.

Eduardo Graziosi Silva - CRB - 8/8907

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **HÉLIO CORREIA DA SILVA JHUNIOR.**

Título da tese: "Integração de imagem micro-CT com Geoestatística de Multi-ponto para modelagem do escoamento em fratura pelo Método dos Elementos Analíticos".

Data da defesa: 13/04/2023.

Comissão Julgadora

Resultado

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

Aprovado

Prof. Dr. **Rodrigo Lilla Manzione**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP-Ourinhos)

Aprovado

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

Aprovado

Prof. Dr. **João Paulo Martins dos Santos**
(Academia da Força Aérea/AFA)

Aprovado

Prof. Dr. **José Eduardo Alamy Filho**
(Universidade Federal de Uberlândia/UFU)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Hidráulica e Saneamento:
Prof. Dr. **Luiz Antonio Daniel**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Titular **Carlos De Marqui Junior**

AGRADECIMENTOS

Primeiramente aos meus pais, Hélio e Vanusa, que sempre incentivaram e apoiaram meus estudos, garantindo todo o necessário para minha formação, e que sofreram com a distância decorrente da mudança de cidade a mais de 400km de distância.

Ao meu amor Denici, minha noiva e esposa (em questão de meses!), que conheci e me apaixonei ao longo do doutorado. Ela foi minha fundação na reta final da pesquisa, dividindo cada momento de dificuldade e respirando aliviada após o depósito.

Ao meu orientador, Edson Wendland, pela paciência, contribuição e apoio nesta pesquisa.

Aos meus amigos Jean, Alan (que me acompanha a mais de 10 anos desde a graduação!) e João Paulo, que me apoiaram e contribuíram significativamente na melhora das minhas habilidades de programação.

Ao Prof. Jaime, por ter me recebido em seu grupo de pesquisa em Valência, auxiliando em minha adaptação no intercâmbio e me permitindo experimentar a verdadeira paella valenciana!

Aos colegas do LHC, pela convivência, ensinamentos e companheirismo.

Ao Prof. Murilo, pela oportunidade de poder prosseguir com sua linha de pesquisa.

Aos demais professores que conheci durante minha trajetória nestes 5 anos de doutorado.

A secretaria do PPGSHS, em especial a Sá e a Rose, sempre eficientes e prestativas.

Ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pela concessão da bolsa de doutorado.

A Capes, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pela bolsa de estudo para doutorado-sanduiche – Código de Financiamento 001.

RESUMO

JHUNIOR, H. C. S. **Integração de imagem micro-CT com a Geoestatística Multiponto para modelagem do escoamento em fratura pelo Método dos Elementos Analíticos**. 2023. 123p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

A caracterização precisa da variabilidade espacial da condutividade hidráulica e sua aleatoriedade, são cruciais para a modelagem do fluxo e transporte de soluto em meios fraturados. A microtomografia de raios-X (micro-CT) caracteriza a geometria da fratura e a distribuição de aberturas em imagens de alta resolução (μm), porém as dimensões da amostra são limitadas entre 1 a 3 cm. A representatividade destas informações pode ser ampliada por meio de técnicas como a Geoestatística Multiponto (GMP). Os algoritmos GMP dependem de imagens de treinamento (IT) para reproduzir os padrões de estruturas complexas que requerem correlações que estão além da correlação de dois pontos. Dentre os métodos de simulação de fluxo subterrâneo, o Método dos Elementos Analíticos (MEA), apresentado por Strack (1989), é uma alternativa aos métodos tradicionais. No MEA, as soluções são obtidas aplicando o princípio da superposição das soluções analíticas dos elementos, como poços (*points*), rios e infiltrações (*line-sinks*), e heterogeneidades (*line-doublets*). O MEA é um método que independe de malha pré-definida, onde são discretizados apenas os limites internos ou externos dos elementos. O objetivo deste trabalho é reproduzir o padrão de distribuição não estacionário de aberturas de uma fratura usando a GMP e aplicar estes dados em um modelo de fluxo, baseado no MEA, visando simular os experimentos de curva de passagem de Lucas (2016). A imagem micro-CT de uma fratura é utilizada como IT. O algoritmo GMP *Direct Sampling* foi implementado para reproduzir os valores de abertura e gerar imagens com dimensões de $10 \times 11 \text{ cm}$ (tamanho das amostras submetidas aos experimentos de curvas de passagem). Inicialmente, uma análise de sensibilidade quantitativa foi realizada nos principais parâmetros do DS, visando otimizar a qualidade das reproduções e tempo de processamento. Junto a uma inspeção visual, o desempenho das simulações geradas foi analisado em termos de histogramas, variogramas e funções de conectividade. A configuração otimizada dos parâmetros viabilizou a simulação dos padrões de abertura da micro-CT para as dimensões $10 \times 11 \text{ cm}$. A simulação das condições do experimento de curva de passagem foi realizada usando *line-doublets* e *line-sinks*. Os resultados mostraram uma boa concordância entre as simulações e os experimentos, em termos de perda de carga e velocidade média do fluxo. Os campos de velocidade gerados pelo MEA e a pluma de dispersão, obtida por meio de um modelo *particle tracking*, permitiram a visualização de canais preferenciais na fratura. No entanto, diferenças significativas entre as curvas de passagem simuladas e experimentais foram observadas. Características como tempo e pico de concentração apresentaram diferenças médias de 8 minutos, levando à conclusão que os campos de velocidade podem estar superestimados.

Palavras-chave: Imagem micro-CT, Geoestatística Multiponto, Método dos Elementos Analíticos, Fratura, Curva de passagem.

ABSTRACT

JHUNIOR, H. C. S. **Integration of micro-CT image with Multiple-point Geostatistics for fracture flow modeling by Analytical Elements Method**. 2023. 123p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Accurate characterization of the spatial variability of hydraulic conductivity and its corresponding uncertainty are crucial for modeling flow and solute transport in fractured media. The nondestructive X-ray micro-tomography (micro-CT) characterizes the fracture geometry and aperture distributions with high-resolution images (μm), however with sample dimensions between 1 to 3 cm. The representativeness of the sample information may be increased by means of geostatistical techniques such as the Multiple-point Geostatistic (MPS). The MPS algorithms rely on training images (TI) to reproduce complex structure patterns that require correlations that are beyond the reach of the two-point correlations. Among the groundwater simulation methods, the Analytic Element Method (AEM), presented by Strack (1989), is an alternative to traditional methods. In AEM, solutions are obtained by applying superposition to the analytic solutions of simple elements such as wells (point elements), rivers and infiltrations (line-sinks), and inhomogeneities (line-doublets). The AEM is a mesh-independent method, which only discretizes the internal or external boundaries but not the whole domain. The aim of this work is to reproduce the non-stationary pattern distribution of fracture apertures using the MPS, and apply this data in a groundwater flow model based in the AEM that represent the breakthrough curve experiments of Lucas (2016). The TI used is a single micro-CT image of a fracture. A MPS Direct Sampling algorithm was implemented to generate the aperture values in images with dimensions of $10\times 11\text{cm}$ (sample size submitted to breakthrough curve experiments). First, a quantitative sensitivity analysis was conducted on the main parameters of DS balancing simulation quality and CPU time. Next to a visual inspection of the generated simulations, the performance was analyzed in terms of histograms, variograms and connectivity functions of pattern reproduction. The optimized parameters configuration allowed the reproduction of the micro-CT aperture patterns for $10\times 11\text{cm}$ dimensions. The breakthrough curve experimental conditions were represented using line-doublets and line-sinks. The results showed good agreement between the head drop and flow velocity estimated and observed in breakthrough curve experiments. The velocity fields generated by AEM and the dispersing plume obtained using a particle tracking model allowed the visualization of preferential channels in the fracture. However, significant differences between simulated and experimental breakthrough curves were observed. Characteristics such as time and peak concentration showed mean differences of 8 minutes, leading to the conclusion that the velocity fields may be overestimated.

Keywords: micro-CT image, Multiple-point Geostatistics, Analytic Element Method, Fracture, Breakthrough curve.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Exemplo de superfície rugosa da parede de uma fratura mapeada usando a técnica de microtomografia.	18
Figura 2. Representação do <i>channeling</i> (em azul) em uma fratura.	18
Figura 3. Exemplo de um variograma exponencial.	21
Figura 4. Aplicação do variograma e da GMP a uma imagem de satélite: (a) Imagem original (b) simulação com variograma e (c) com GMP.	22
Figura 5. Histogramas referentes as Figura 4b e 4c.	22
Figura 6. Configuração dos n pontos próximos ao ponto de interesse.	23
Figura 7. Diferença principal entre os algoritmos GMP baseados em padrões e pixels.	24
Figura 8. Ilustração do método Direct Sampling.	26
Figura 9. DS aplicado a um conjunto de dados contínuos – 200×200 pontos: (a) IT e (b) simulação pelo DS utilizando 100 dados condicionais.	27
Figura 10. Aplicação do DS para melhoria e reconstrução de uma imagem de temperatura (K) do verão no sudeste da Austrália (resolução de 50 km): (a) dados brutos e (b) simulação pelo DS.	28
Figura 11. Funcionamento do FILTERSIM: (a) identificação dos padrões extraídos da IT de acordo com filtros definidos e (b) IT “recortada” segundo determinada janela de busca. ..	29
Figura 12. Resultados obtidos pelo FILTERSIM: (a) IT e (b) simulação obtida.	30
Figura 13. Sequência de preenchimento pelo CCSIM: (a) IT e (b) sequência de simulação na malha utilizando a OL.	31
Figura 14. Disposição e a diferença entre as malhas do MDF e MEF: (a) fenômeno a ser modelado, (b) MDF e (c) MEF.	33
Figura 15. Exemplo da aplicação de line-doublets pelo MEA: (a) polígono de line-doublets de condutividade zero, (b) detalhe de uma das extremidades e (c) polígono com condutividades variadas.	37
Figura 16. Efeito das inomogeneidades com condutividades variadas na modelagem do escoamento subterrâneo: (a) visão geral e (b) ampliações sucessivas de regiões delimitadas.	37
Figura 17. Aquífero com zona de transição entre confinado e livre.	39
Figura 18. Transformação da coordenada global z pala local Z.	42
Figura 19. Line-doublet com a identificação dos lados interno e externo.	45
Figura 20. Características do line-sink.	49
Figura 21. Testemunhos de basalto retirados da Formação Serra Geral.	51
Figura 22. Campo de abertura da fratura (amostra de 2,8×2,4 cm) representado em resolução 938×838 pixels. A escala de cores indica ausência de abertura (valor 0 μm) e máxima abertura (500 μm).	52
Figura 23. Fluxograma do método DS.	55
Figura 24. Ilustração do método DS.	55

Figura 25. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $n = 5$, (b) $n = 10$, (c) $n = 20$, (d) $n = 30$, (e) $n = 40$, (f) $n = 50$, (g) $n = 80$ e (h) IT.	63
Figura 26. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro n : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo médio de processamento requerido.	64
Figura 27. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $t = 0,10$; (b) $t = 0,25$; (c) $t = 0,5$; (d) $t = 0,75$ e (e) IT.	68
Figura 28. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro t : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo de processamento requerido.	68
Figura 29. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $f = 0,10$; (b) $f = 0,25$; (c) $f = 0,5$; (d) $f = 0,75$ e (e) IT.	71
Figura 30. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro f : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo de processamento requerido.	71
Figura 31. (a) Reprodução expandida dos padrões de distribuição da IT utilizando o DS (destacados em vermelho os dados condicionais) e (b) IT.	74
Figura 32. Métricas estatísticas das imagens expandidas obtidas pelo DS: (a) histogramas, (b) variogramas e (c) funções conectividade.	74
Figura 33. Experimento desenvolvido por Lucas (2016): (a) aparato laboratorial e (b) projeto, e em (c) modelo conceitual baseado no MEA representando o experimento.	77
Figura 34. Curvas de passagem do experimento de bancada para as diferentes vazões de injeção.	78
Figura 35. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	79
Figura 36. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	80
Figura 37. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	81
Figura 38. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	82
Figura 39. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$	84
Figura 40. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$ utilizando 900 line-doublets: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes.	85
Figura 41. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW com 400 line-doublets (400 LD) e 900 line-doublets (900 LD), para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$	86
Figura 42. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	87

Figura 43. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	88
Figura 44. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	89
Figura 45. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	90
Figura 46. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$	91
Figura 47. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	92
Figura 48. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	93
Figura 49. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	94
Figura 50. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	95
Figura 51. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$	96
Figura 52. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	97
Figura 53. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	98
Figura 54. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	99
Figura 55. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.	100
Figura 56. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Principais parâmetros do modelo MEA.	77
Tabela 2 - Principais resultados obtidos por Lucas, Cantareira e Wendland (2019).....	77

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

GMP	Geoestatística Multiponto
micro-CT	Microtomografia computadorizada de raios-X
CCSIM	<i>Cross Correlation based Simulation</i>
SNESIM	<i>Single Normal Equation Simulation</i>
DS	<i>Direct Sampling</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MEA	Método dos Elementos Analíticos
IT	Imagem de treinamento
ENESIM	<i>Extended Normal Equation Simulation</i>
SNESIM	<i>Single Normal Equation Simulation</i>
IMPALA	<i>Parallelized Algorithm Based on a List Approach</i>
HOSIM	<i>High-Order Stochastic Simulation</i>
SIMPAT	<i>SIMulation with PATterns</i>
FILTERSIM	<i>Filter-based Simulation</i>
CCSIM	<i>Cross Correlation based Simulation</i>
PPP	Modelo das Placas Planas Paralelas
FDP	Função de densidade de probabilidade
FC	Função conectividade
q	Descarga específica ($L^2.L^{-1}.T^{-1}$)
Q	Descarga por unidade de largura ($L^3.L^{-1}.T^{-1}$)
K	Condutividade hidráulica ($L.T^{-1}$)
ϕ	Carga hidráulica (L)
b	Elevação da base do aquífero (L)
H	Espessura do aquífero (L)
Φ	Potencial de descarga ($L^2.T^{-1}$)
Ψ	Linhas de corrente
z	Variável complexa
W	Vetor descarga complexo ($L^2.T^{-1}$)
Ω	Potencial complexo

α	Ângulo direcional
L	Comprimento (L)
λ	Função de salto
p	Polinômio de correção
Z	Coordenada local no plano complexo
a_n	Coefficientes da série de expansão
T_n	Polinômio de Chebyshev
N	Ordem da série de Chebyshev
C	Constante do ponto de referência
n_e	Porosidade efetiva
v	Velocidade média de escoamento do fluido (L.T ⁻¹)
n	Número de vizinhos próximos
t	Critério de diferença máxima
f	Máxima fração da IT
ρ	Massa específica do fluido (M.L ⁻³)
g	Vetor de aceleração da gravidade (L.T ⁻²)
h	Distância (L)
a	Abertura da fratura (L)
η	Viscosidade dinâmica do fluido (F.T.L ⁻²)
σ	Taxa de injeção/extração (L ² .T ⁻¹)

SUMÁRIO

RESUMO	8
ABSTRACT	9
1. INTRODUÇÃO	15
2. OBJETIVOS.....	17
2.1. GERAL	17
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	17
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	18
3.1. ESCOAMENTO EM MEIO FRATURADO	18
3.2. GEOESTATÍSTICA	20
3.2.1. Variograma	20
3.2.2. Geoestatística Multiponto (GMP).....	23
3.3. MODELAGEM DO ESCOAMENTO EM FRATURAS	31
3.3.1. Modelo das Placas Planas Paralelas.....	31
3.3.2. Método das Diferenças Finitas e dos Elementos Finitos	32
3.3.3. Método dos Elementos Analíticos (MEA).....	35
4. MATERIAIS E MÉTODOS	50
4.1. IMAGEM DE TREINAMENTO (IT).....	51
4.2. ALGORITMO <i>DIRECT SAMPLING</i> (DS).....	52
4.3. ALGORITMO MEA – <i>LINE DOUBLETS</i>	55
4.3.1. Matriz de Solução	55
4.3.2. Método de Gauss-Seidel	59
4.3.3. Campo de velocidades	60
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	62
5.1. <i>DIRECT SAMPLING</i>	62
5.1.1. Número de vizinhos próximos n	62
5.1.2. Diferença máxima t	67
5.1.3. Fração máxima f da IT	70
5.2. MODELO DE ESCOAMENTO MEA	75
5.2.1. $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$	78
5.2.2. $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$	86
5.2.3. $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$	91
5.2.4. $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$	96
6. CONCLUSÕES.....	102
6.1. PERSPECTIVAS FUTURAS	103
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	105

8.	ANEXOS.....	113
----	-------------	-----

1. INTRODUÇÃO

A caracterização precisa da variabilidade espacial da condutividade hidráulica e de sua incerteza correspondente são cruciais para modelar o escoamento e o transporte de solutos em meios fraturados. Trata-se de uma questão chave para avaliação de risco ambiental, remediação de áreas contaminadas e projeto de repositórios subterrâneos para material radioativo, assim como para a extração de água (FAYBISHENKO, WITHERSPOON e BENSON, 2000; BONNET *et al.*, 2001; WATANABE *et al.*, 2011; NOWAMOOZ *et al.*, 2013).

Várias técnicas têm sido utilizadas para caracterizar a geometria de uma fratura e suas distribuições de abertura, como o uso de injeção de resina de endurecimento (HAKAMI e STEPHANSSON, 1993), perfilometria de superfície (SCHMITTBUHL *et al.*, 2008) e tomografia computadorizada de raios-X (KETCHAM e CARLSON, 2001). Nas últimas três décadas, vários pesquisadores empregaram a técnica não destrutiva de microtomografia computadorizada de raios-X (micro-CT) para medir tamanhos de abertura de fratura (ZHU *et al.*, 2007; KYLE e KETCHAM, 2015; LUCAS, CANTAREIRA e WENDLAND, 2019). A principal vantagem da micro-CT sobre outras técnicas é que, para uma amostra em escala de centímetros, esta fornece imagens 3D de alta qualidade e permite o isolamento digital de seções de interesse na amostra. No entanto, na tecnologia micro-CT, a resolução das imagens obtidas está relacionada ao tamanho da amostra, onde dimensões com diâmetros de 1 cm a 12 cm são cruciais para uma alta resolução (μm) (KYLE e KETCHAM, 2015; BOTHA e SHEPPARD, 2016; KARIMPOULI *et al.*, 2017). A representatividade da amostra pode ser limitada por esta operação. A extração de subamostras é uma opção, mas sempre estará sob influência de tensões mecânicas ou vibrações causadas pela perfuração (KARPYN, GRADER e HALLECK, 2009).

Estudos onde há uma quantidade limitada de medições diretas (por exemplo, amostras de basalto fraturado, micro-CT), representações das propriedades heterogêneas hidrogeológicas são comumente caracterizadas ou geradas por meio de técnicas geoestatísticas, como a simulação sequencial gaussiana (DEUTSCH e JOURNAL, 1998), a simulação condicional de indicadores (GÓMEZ-HERNÁNDEZ e SRIVASTAVA, 1990), e a Geoestatística Multipontos (STREBELLE, 2002), entre outros métodos relacionados.

A geoestatística é amplamente usada para gerar campos aleatórios estocásticos para modelar e caracterizar fenômenos espaciais, como características da superfície terrestre e estruturas geológicas. Nas últimas três décadas, a Geoestatística Multipontos (GMP) surgiu como um método para representar estruturas mais complexas que requerem correlações que estão muito além das correlações de dois pontos fornecidas por um modelo de variograma

tradicional (GUARDIANO e SRIVASTAVA, 1993). Os algoritmos GMP dependem de imagens de treinamento, que são imagens com características semelhantes às da área estudada (por exemplo, uma imagem micro-CT de uma fratura). Os algoritmos GMP mais comuns são o *Single Normal Equation Simulation - SNESIM* (STREBELLE, 2002), *Cross Correlation based Simulation - CCSIM* (TAHMASEBI, HEZARKHANI e SAHIMI, 2012) e o *Direct Sampling - DS* (MARIETHOZ, RENARD e STRAUBHAAR, 2010).

O conhecimento apropriado sobre a heterogeneidade é um fator crucial para a acurácia do modelo numérico de previsão (HOTEIT e FIROOZABADI, 2008). As realizações obtidas a partir da aplicação da GMP em imagens micro-CT de uma fratura podem ser usadas como informações de entrada em um modelo numérico de escoamento. A possibilidade de utilizar dados reais e não deformados de aberturas de fratura permite uma validação mais precisa de um modelo, principalmente no que se refere à possibilidade de comparar as simulações obtidas com o comportamento experimental do fluxo em amostras de mesma origem.

Os processos de fluxo de águas subterrâneas são normalmente simulados pelos Métodos das Diferenças Finitas (MDF) e dos Elementos Finitos (MEF) (BEAR, 1988). No entanto, o Método dos Elementos Analíticos (MEA), desenvolvido por Strack (1989), é uma das alternativas ao MDF/MEF. No MEA, os elementos hidrogeológicos que agem sobre o escoamento subterrâneo, como poços, rios, lagos, extrações e inomogeneidades, são descritos na forma de soluções analíticas individuais que são reunidas linearmente, pelo princípio da superposição, para compor a solução final (STRACK, 1989). Ao contrário do MDF e MEF, o MEA é um método que independe de um domínio discretizado, sendo necessário apenas a definição dos limites, internos ou externos, de cada elemento analítico. Vários estudos relatam as vantagens das soluções de fluxo geradas pelo MEA (GOMES, 2002; BATISTA, SCHULZ e WENDLAND, 2003; BADV e DERISZADEH, 2005; MAJUMDER e ELDHO, 2016).

No Brasil, ainda não se encontram estudos sobre escoamento em fraturas basálticas que envolvam resultados obtidos em experimentos de fluxo em escala de laboratório, juntamente com simulação computacional do escoamento. Assim, esta pesquisa se propôs a realizar a integração de uma imagem de micro-CT com o algoritmo GMP *Direct Sampling*, para gerar reproduções dos padrões de distribuição de abertura, visando sua utilização na busca de resultados mais realísticos do escoamento de água em uma fratura (isto é, considerando fortemente a heterogeneidade) a partir de um modelo de simulação baseado no MEA.

2. OBJETIVOS

2.1. GERAL

O objetivo principal desta pesquisa foi demonstrar os efeitos da heterogeneidade das aberturas no escoamento em uma única fratura, a partir da integração da geoestatística multiponto com um modelo analítico de simulação de escoamento.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

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

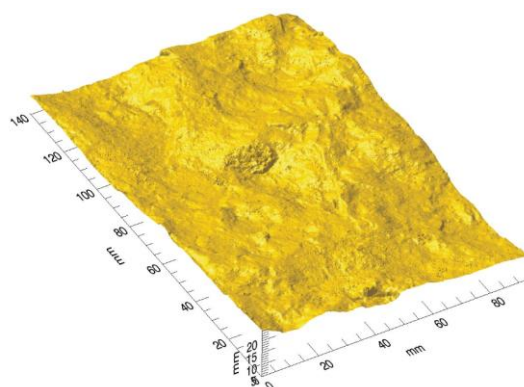
- Implementar um algoritmo geoestatístico capaz de utilizar uma imagem micro-CT de uma amostra de basalto fraturado para reproduzir o padrão aleatório de distribuição de abertura;
- Desenvolver um modelo de simulação de escoamento em um plano de fratura baseado no Método dos Elementos Analíticos;
- Comparar as simulações obtidas pelo modelo analítico com resultados experimentais em testemunhos de basalto fraturado.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. ESCOAMENTO EM MEIO FRATURADO

Segundo Ketcham, Slottke e Sharp (2010), a geologia das rochas de basalto é caracterizada por estratos fraturados e porosos, estruturas heterogêneas e complexas, com distribuição espacial não estacionária nas 3 dimensões, dificultando a modelagem dos processos de fluxo de fluidos no seu interior (Figura 1).

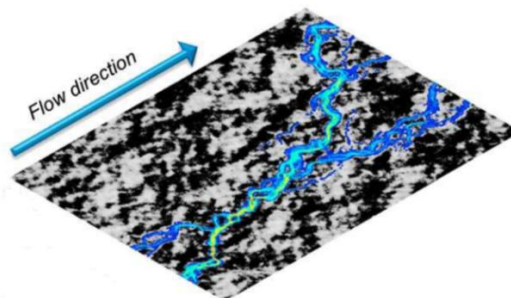
Figura 1. Exemplo de superfície rugosa da parede de uma fratura mapeada usando a técnica de microtomografia.



Fonte: Ketcham, Slottke e Sharp (2010).

As propriedades hidráulicas contrastantes desses estratos determinam a taxa e a direção do movimento do fluido, definindo seu caminho preferencial no plano da fratura, fenômeno esse também conhecido como *channeling* (NEUMAN, 2005) (Figura 2). Características como a distribuição de probabilidade das aberturas, o comprimento e a largura de cada canal individual, e o comprimento de correlação espacial das aberturas são importantes na modelagem do escoamento neste meio (TSANG, Y. e TSANG, C. 1987).

Figura 2. Representação do *channeling* (em azul) em uma fratura.



Fonte: Ishibashi *et al.* (2015).

As abordagens conceituais usadas atualmente na modelagem do fluxo de fluidos em meios fraturados geralmente se enquadram em duas categorias distintas. A primeira

considera o escoamento no meio poroso e no interior da fratura. Já a segunda abordagem baseia-se no conceito de que a massa rochosa é composta de blocos impermeáveis, separados por sistemas de fraturas consideradas condutos (BACA, ARNETT e LANGFORD, 1984). Os estudos apresentados nas últimas três décadas mostraram que o fluxo e transporte de contaminantes em uma fratura individual depende quase que exclusivamente da geometria da fratura (KELLER, ROBERTS e BLUNT, 1999; LUCAS, CANTAREIRA E WENDLAND, 2019). Assim, conhecer o interior do seu plano é fundamental para a modelagem do fluxo subterrâneo.

Os valores de abertura de fratura podem ser medidos por meio de técnicas físicas e/ou inferidas por meio de funções matemáticas. A estimativa do campo de abertura depende das rugosidades presentes na superfície das paredes da fratura, sendo inúmeras as técnicas para isto, tais como a injeção de resina epóxi, a medição da superfície topográfica com perfilômetros, a utilização de moldes de resina e a injeção de um traçador (LUCAS, 2016). Entretanto, estas técnicas podem deformar as amostras e, na maioria dos casos, os valores são obtidos de forma indireta.

A microtomografia computadorizada de raios-X (micro-CT) é uma opção aos métodos tradicionais, sendo uma técnica não invasiva capaz de analisar a estrutura interna de materiais opacos (KETCHAM, SLOTTKE e SHARP, 2010; POLAK *et al.*, 2004; ZHU *et al.*, 2007). Sua utilização na caracterização e quantificação de processos físicos, como o escoamento de água em meios porosos e meios fraturados é ampla (KELLER, ROBERTS e BLUNT, 1999; MONTEMAGNO e PYRAK-NOLTE, 1999; BERTEL, DICARLO e BLUNT, 2001; WATANABE *et al.*, 2011). Esta técnica utiliza a emissão de raios-X, que penetram no objeto, para revelar detalhes do seu interior por meio de uma imagem digital em uma resolução espacial superior a 50 microns (KYLE e KETCHAM, 2015). O processo para a criação destas imagens baseia-se na captura de múltiplas projeções de um objeto sobre uma série de orientações angulares. A desvantagem da técnica de micro-CT está no limite de tamanho das amostras que podem ser ensaiadas. No caso de rochas basálticas, a presença de minerais que atenuam a radiação, a exemplo dos óxidos de ferro e silicatos, limitam o tamanho do objeto a ser escaneado a valores da ordem de uma polegada (KETCHAM, SLOTTKE e SHARP, 2010). Esta limitação de dimensões impactam a representatividade da informação obtida pela micro-CT. Experimentos de bancada que avaliam o fluxo e transporte de solutos em fraturas geralmente utilizam testemunhos com dimensões, em média, 5 vezes o tamanho de uma amostra submetida a micro-CT (LUCAS, CANTAREIRA e WENDLAND, 2019). Além disso, modelos de simulação usualmente

reproduzem cenários de escoamento em escalas significativamente maiores (MAJUMDER e ELDHO, 2017; BOICO, WENDLAND e BATISTA, 2018). Assim, a utilização das informações obtidas pela micro-CT para análises comparativas se torna um limitante devido às dimensões que representam.

Existem funções matemáticas capazes de identificar as correlações espaciais de uma variável física com distribuição não estacionária, como as aberturas de uma fratura, e repetir tais padrões, além da possibilidade de sua reprodução em escalas maiores. Métodos geoestatísticos são uma opção para tal objetivo.

3.2. GEOESTATÍSTICA

Modelos geoestatísticos são representações estocásticas de fenômenos onde são incorporadas tanto informações locais quanto globais (MARIETHOZ, 2009). A geoestatística utiliza metodologias, como *Kriging* (YOUNG, 1987) e a simulação estocástica (GÓMEZ-HERNÁNDEZ, FRANSSEN e CASSIRAGA, 2001), para estimar ou simular o valor de um fenômeno, com variabilidade espacial aleatória, em um determinado ponto de uma região de interesse sem dados conhecidos, sendo tal valor condicionado a dados existentes (MARIETHOZ e CAERS, 2014). Os métodos estocásticos tradicionais empregam com frequência o variograma para caracterizar espacialmente a heterogeneidade de um determinado parâmetro (GÓMEZ-HERNÁNDEZ, SAHUQUILLO e CAPILLA, 1997; CAERS, 2005).

3.2.1. Variograma

A função de correlação espacial de um variograma parte do princípio da expectativa de que um valor estimado $Z(u+h)$ seja o mais próximo de um valor conhecido $Z(u)$. Ou seja, a esperança que a diferença entre estes valores seja mínima. Estes pontos estão separados por uma certa distância h e orientados segundo uma direção (Equação 1).

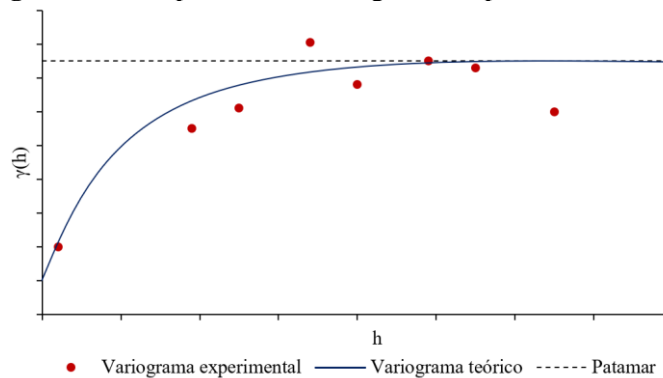
$$E[Z(u+h) - Z(u)] \quad \text{seja mínima} \quad (1)$$

Considerando todas as variáveis de um fenômeno, o variograma assume que o valor desta esperança matemática é constante para todas as realizações do processo estocástico para uma certa distância. Isto indica que a média e a covariância são estacionárias, além da ergodicidade estatística (MARIETHOZ e CAERS, 2014). Assim, considerando a análise de um conjunto de dados experimentais, sua equação passa a ser (Equação 2):

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

Em que: n é o número de pares de pontos de um conjunto de dados amostrados em uma direção separados por uma distância h . A representação gráfica característica do variograma é apresentada na Figura 3.

Figura 3. Exemplo de um variograma exponencial.



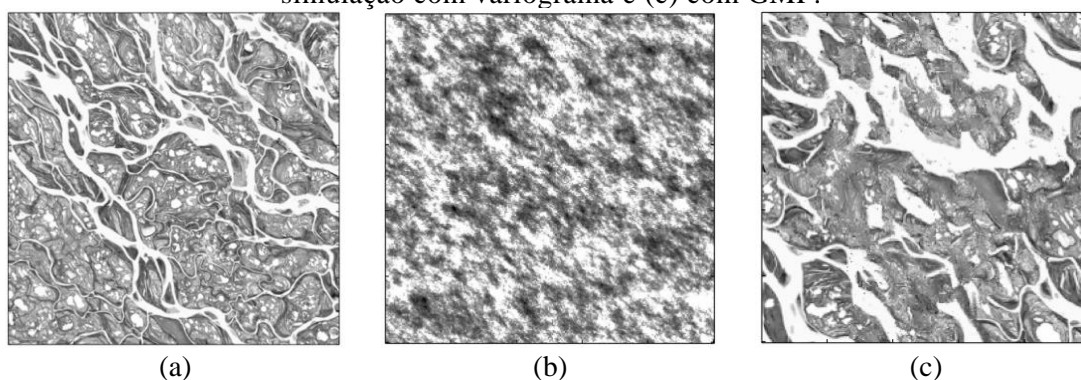
Fonte: Autor (2023).

A Figura 3 permite identificar, para uma determinada direção, a distância máxima na qual existe uma correlação espacial entre os dados analisados (valores de $\gamma(h)$ abaixo do patamar) e o quão estacionário um fenômeno pode ser. A curva do variograma é obtida a partir do ajuste de modelos teóricos (exponencial, gaussiano, esférico, penta-esférico e quadrático racional) aos valores experimentais resultantes da aplicação da Equação 2 (LY, CHARLES e DEGRÉ, 2011).

Entretanto, a descrição realística completa de meios heterogêneos complexos pode não ser obtida apenas com o variograma, resultando na ausência ou pouca presença de correlação espacial do parâmetro (KOLTERMANN e GORELICK, 1996). A Equação 2 é apenas uma maneira muito simples de expressar uma tendência, podendo não se aplicar a todos os fenômenos. A suposição da estacionariedade dos dados amostrais pode não ser válida. Qualquer tentativa de calcular estatísticas espaciais não estacionárias, por exemplo, limitando o agrupamento a uma região geográfica local em torno do ponto que está sendo estimado, levará apenas a uma maior dizimação dos dados já esparsos (ZIEGEL e BEYER, 2006). Além disso, um fenômeno espacial pode possuir uma baixa correlação espacial de ordem 2, ou seja, considerando apenas duas localizações espaciais ao mesmo tempo, podendo exibir uma correlação muito mais forte em ordens superiores (MARIETHOZ e CAERS, 2014).

Para ilustrar isso, Mariethoz (2009) comparou as realizações obtidas usando um modelo ajustado a partir de um variograma experimental (Figura 4b), com aquelas resultantes da aplicação do algoritmo de Geoestatística Multiponto (GMP) - *Direct Sampling* (Figura 4c). A GMP é uma opção aos métodos tradicionais, sendo uma alternativa promissora, embora já consolidada na literatura (MARIETHOZ e CAERS, 2014). Ambas simulações foram baseadas nos dados amostrais de uma fotografia de satélite do Lena Delta, Rússia (Figura 4a).

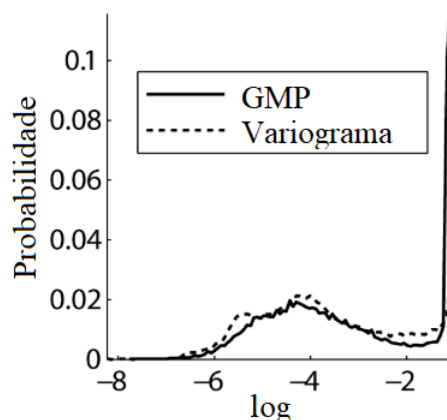
Figura 4. Aplicação do variograma e da GMP a uma imagem de satélite: (a) Imagem original (b) simulação com variograma e (c) com GMP.



Fonte: Mariethoz (2009).

Pode-se observar que os resultados obtidos são visualmente diferentes, sendo aquele referente ao variograma (Figura 4b) muito distante do original (Figura 4a). Esta diferença é clara, embora os histogramas de ambas as realizações sejam próximos (Figura 5). O variograma consegue obter o padrão aleatório apenas na “vizinhança próxima”, excluindo as características presentes em uma escala maior (MARIETHOZ e CAERS, 2014).

Figura 5. Histogramas referentes as Figura 4b e 4c.



Fonte: Mariethoz (2009).

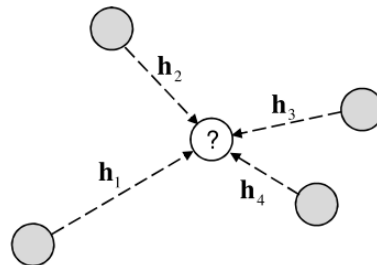
Os exemplos apresentados mostram que a utilização de histogramas e variogramas não são suficientes para obter padrões de conectividade realistas de certos fenômenos, e enfatiza a necessidade de outros métodos geoestatísticos capazes de lidar com estruturas de alta entropia e não multi-Gaussianas (ARPAT, 2005; STREBELLE e CAVELIUS, 2014; TAKAFUJI, ROCHA e RAMOS, 2018; MEERSCHMAN, VAN MEIRVENNE e VAN DE VIJVER, 2013; LI *et al.*, 2015).

3.2.2. Geoestatística Multiponto (GMP)

A geoestatística multiponto (GMP) assume a hipótese de que certas propriedades heterogêneas são muito complexas para serem representadas apenas pela tradicional abordagem do variograma (GUARDIANO e SRIVASTAVA, 1993). Por exemplo, é impossível saber se os valores altos de condutividade hidráulica são conectados ou pertencem a blocos isolados baseando-se apenas em um modelo de variograma de dois pontos. Por utilizar estatísticas de uma configuração de mais de dois pontos, a GMP permite a reprodução de correlações espaciais não lineares (HONARKHAH e CAERS, 2010).

A utilização de 3, 4 ou mais pontos (geralmente entre 15 e 80) para se obter uma função de correlação espacial capaz de representar um fenômeno complexo é viabilizada a partir de uma imagem conceitual que caracteriza as propriedades da heterogeneidade de interesse (LI *et al.*, 2015). Essa imagem conceitual é chamada de imagem de treinamento (IT). Para a reprodução de determinado fenômeno a GMP assume um modelo de busca com uma configuração com n nós ao redor de um ponto de interesse u (Figura 6 – representação “?”) separados por certas distâncias h (h_1, h_2, \dots, h_n), em uma determinada malha de simulação.

Figura 6. Configuração dos n pontos próximos ao ponto de interesse.



Fonte: Mariethoz e Caers (2014).

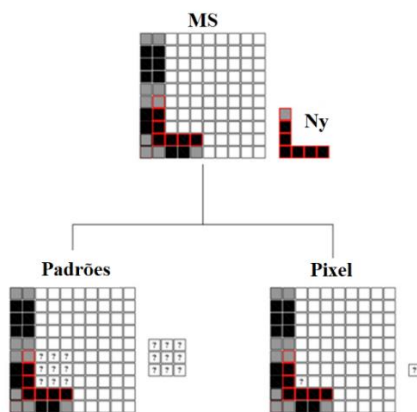
Com base neste modelo, é feita uma busca em regiões da IT (denominadas *template* ou janela de busca) para todas as repetições da configuração com as n variáveis, sendo $Z_1 = z(u + h_1), \dots, Z_n = z(u + h_n)$ o valor das variáveis próximas. Isso permite inferir a distribuição

condicional de probabilidade empírica de $Z(u)$ no ponto u . Pode-se então extrair um valor $z(u)$ desta distribuição na IT conforme um padrão de similaridade d_n , e atribuí-lo à malha de simulação (Equação 3):

$$F(z, u, h_n) = \text{Prob}\{Z(u) \leq z | d_n\} \quad (3)$$

O potencial e a necessidade de representar fenômenos físicos complexos, com características não-lineares, exigiu o desenvolvimento de muitos algoritmos de GMP nos últimos anos (ZIEGEL e BEYER, 2006). Estes algoritmos são classificados em dois grupos principais, ambos seguindo etapas de busca e seleção similares. O primeiro método, denominado *pixel based* (baseado em pixel), realiza a geoestatística pixel a pixel da IT, enquanto o segundo, nomeado *pattern based* (baseado em padrões), analisa um conjunto deles ao mesmo tempo. A Figura 7 ilustra a principal diferença entre estes dois grupos. A malha de simulação é mostrada no topo, com pontos já preenchidos e outros ainda a serem simulados. N_y é o conjunto de dados que caracteriza os vizinhos próximos. Na parte inferior, à esquerda, é exemplificada a versão do grupo onde nove pontos são simulados de uma vez (*pattern based*) e à direita, o caso em que apenas um ponto é simulado a cada iteração (*pixels based*).

Figura 7. Diferença principal entre os algoritmos GMP baseados em padrões e pixels.



Fonte: adaptada de Rezaee et al. (2013).

Ambos os métodos têm vantagens e desvantagens. Os algoritmos baseados em padrões exigem menos esforço computacional, principalmente em termos de tempo de processamento, mas a aleatoriedade dos resultados é menor que a obtida na análise por pixels individuais. Segundo Ziegel e Beyer (2006), os métodos GMP baseados em *pixels* podem reproduzir melhor escalas locais em modelos geológicos complexos. Por outro lado, as técnicas baseadas em padrões trazem uma representação mais precisa do modelo em escala global. Atualmente, as

duas abordagens possuem capacidade de reprodução de dados condicionantes e estruturas geológicas de forma realista, sendo consolidadas e promissoras, cabendo ao usuário escolher a mais adequada para a situação estudada (MARIETHOZ e CAERS, 2014).

3.2.2.1 Algoritmos GMP Baseados em Pixels (*Pixel-Based*)

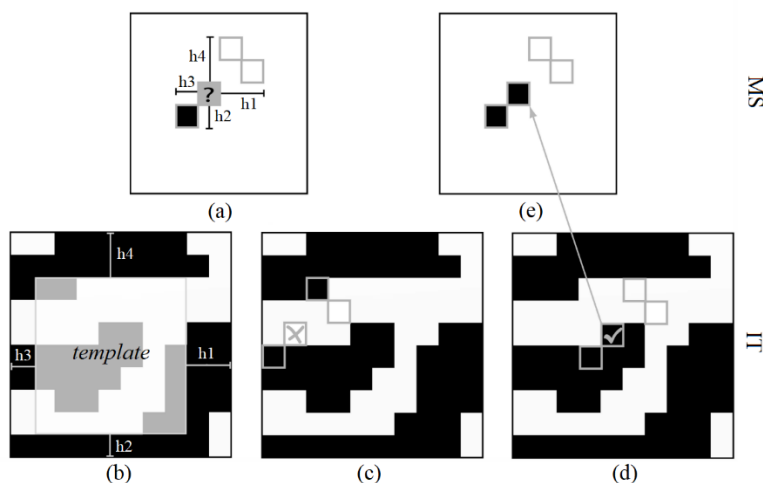
O primeiro algoritmo GMP desenvolvido foi o *Extended Normal Equation Simulation* (ENESIM), sendo implementado por Guardiano e Srivastava (1993). Este algoritmo é baseado em um conceito estendido de Krigagem de indicador (*Kriging*), que permite a reprodução de múltiplos eventos inferidos de uma IT (GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 2015). Seguindo os conceitos básicos da GMP, o ENESIM busca os dados ao redor de cada ponto a ser simulado, e examina a IT para identificar todas as ocorrências similares. Então, uma distribuição condicional para todas as ocorrências identificadas é construída, sendo baseada em um histograma da região analisada, dentro da janela de busca. Uma das principais desvantagens desse algoritmo é a varredura da IT para cada ponto simulado, o que torna impraticável para grandes imagens de treinamento e janelas de busca. Devido a este custo alto de processamento, este algoritmo se tornou obsoleto, sendo redesenhado posteriormente no algoritmo *Single Normal Equation Simulation* (SNESIM) (STREBELLE, 2002).

O SNESIM diminui os custos com memória, por meio do armazenamento de todas as probabilidades de padrões existentes na IT, analisados conforme um tamanho de janela de busca, em uma árvore de busca (*search tree*) (BOUCHER, 2009; HONARKHAH e CAERS, 2010). Por meio deste artifício, não é necessário “escanear” a IT para cada ponto simulado, sendo feito apenas uma vez antes do início da simulação. O SNESIM utiliza o conceito de grades múltiplas (*multiple-grid*) para diminuir o esforço computacional gasto para armazenar as probabilidades condicionais nas árvores de busca. Inicialmente, padrões de grande escala da IT são atribuídos à malha de simulação com um certo espaçamento por meio de um *template*. Os próximos pontos a serem simulados utilizam estes dados preenchidos como condicionais para a busca por padrões de escala menores (locais) por meio de um *template* menor. Ao encontrar padrões que se ajustam a estes condicionais, seus valores são atribuídos à malha de simulação entre os espaçamentos definidos na primeira grade (STREBELLE e CAVELIUS, 2014). Uma das limitações do SNESIM é sua dificuldade em obter reproduções realistas de fenômenos geológicos de alta conectividade e com estruturas com escalas maiores (TAHMASEBI, SAHIMI e CAERS, 2014). O uso de armazenamento de árvore de busca pode diminuir o uso de memória HD, entretanto, pode ampliar o uso de RAM (MARIETHOZ e CAERS, 2014).

Outros algoritmos seguem a base do SNESIM: IMPALA e HOSIM. O IMPALA (*Parallelized Algorithm Based on a List Approach*) utiliza uma combinação de lista com árvores de busca, juntamente com um processo de paralelização, diminuindo a memória RAM necessária (STRAUBHAAR *et al.*, 2011). O HOSIM (*High-Order Stochastic Simulation*), utiliza cumulantes para armazenar os padrões da IT na árvore de busca (MUSTAPHA e DIMITRAKOPOULOS, 2011).

Dentre os demais algoritmos *pixel-based*, vale ressaltar o *Direct Sampling* (DS), desenvolvido por Mariethoz (2009). O DS segue basicamente os conceitos do ENESIM, em que o processo se resume em “escanear”/examinar sequencialmente partes da IT dentro de uma janela de busca pré definida e reproduzir determinado padrão na malha de simulação, um pixel de cada vez (Figuras 8a e 8b). Entretanto, ao invés de calcular uma distribuição cumulativa condicional por meio da convolução da IT, o DS coleta diretamente da IT um evento de dados sem calcular probabilidades (MEERSCHMAN, VAN MEIRVENNE e VAN DE VIJVER, 2013). Computacionalmente, isso resulta em uma convolução interrompida, ou seja, a varredura é finalizada no primeiro evento de dados correspondentes.

Figura 8. Ilustração do método *Direct Sampling*.



Fonte: Mariethoz, Renard e Straubhaar (2010).

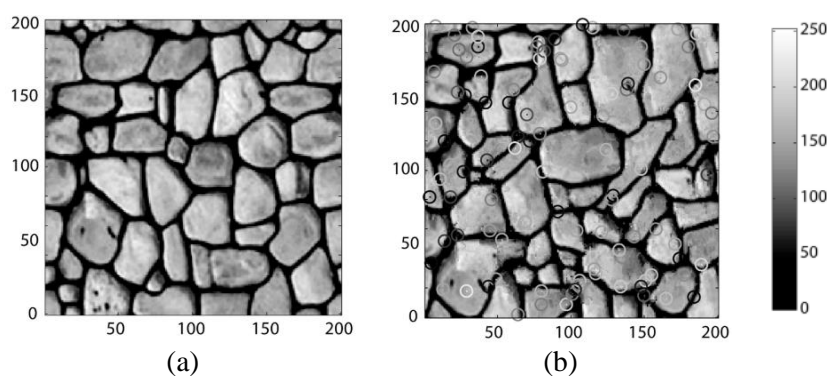
A avaliação de similaridade é feita através de uma função de diferença máxima t entre os valores buscados e os já simulados, influenciando fortemente o desempenho do DS, devendo ser escolhida apropriadamente para variáveis categóricas ou contínuas (ZIEGEL e BEYER, 2006). Para variáveis categóricas, a distância limite define o número máximo de pontos incompatíveis em cada ponto simulado. A IT é então analisada (Figura 8c), e na primeira ocorrência de similaridade encontrada, o valor do ponto central do evento de dados na IT é aceito e atribuído ao ponto analisado na simulação (Figuras 8d e 8e). Partes da IT são

escaneadas para cada ponto a ser simulado, tornando desnecessário um banco de dados e, conseqüentemente, menos memória RAM (HONARKHAH e CAERS, 2010).

O número de vizinhos próximos n é um importante parâmetro para a qualidade das simulações. Meerschman, Van Meirvenne e Van De Vijver (2013) recomendam utilizar entre 10 vizinhos próximos para casos simples de imagens binárias e estacionárias, e 60 para estruturas complexas, principalmente tridimensionais. A diferença máxima t , valor adimensional que varia entre 0 e 1, não deve ser igual a zero, pois além de aumentar drasticamente o tempo de processamento, pode levar à cópia literal do IT. Para a maioria dos casos analisados, um valor máximo de t igual a 0,1 é o ideal (MARIETHOZ e CAERS, 2014). A fração máxima da IT a ser “escaneada” é outro parâmetro do DS. Embora as simulações não sejam muito sensíveis a este parâmetro, menores percentuais reduzem significativamente o tempo de computação. Se a IT possuir dimensões acima de 500×500 pontos, recomenda-se utilizar inicialmente valores iguais a 0,1, e somente se os resultados não forem satisfatórios, aumentar o valor para 0,5 (REZAEI *et al.*, 2013). Assumir a fração máxima como o tamanho da própria IT também podem levar a sua cópia exata.

O DS pode ser aplicado a fenômenos com características complexas, com relações não-lineares entre as variáveis e de não estacionariedade, como heterogeneidades geológicas e geofísicas. A Figura 9b exemplifica a capacidade do DS em reproduzir estes padrões, onde o resultado obtido é similar a IT (Figura 9a), mas não uma cópia idêntica. A rapidez de processamento e a economia em termos de memória, somados à facilidade de implementação e paralelização, estão entre as vantagens do DS em relação aos demais algoritmos deste grupo (MARIETHOZ, RENARD e STRAUBHAAR, 2010).

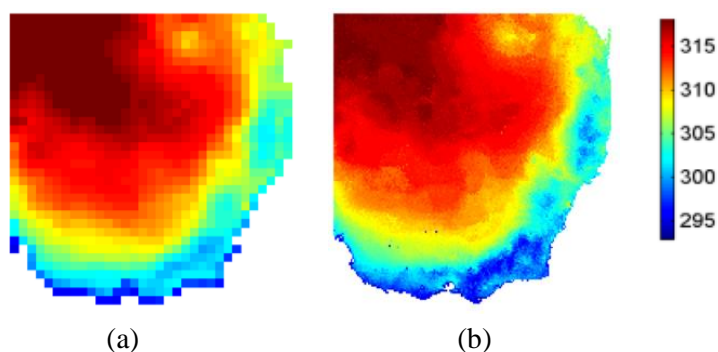
Figura 9. DS aplicado a um conjunto de dados contínuos – 200×200 pontos: (a) IT e (b) simulação pelo DS utilizando 100 dados condicionais.



Fonte: Mariethoz, Renard e Straubhaar (2010).

Jha *et al.* (2013) avaliaram a capacidade do DS para melhorar a qualidade de imagens de satélite referentes a variáveis climáticas, incluindo temperatura da superfície, umidade do solo e fluxo de calor latente do sudeste da Austrália. Foi possível ampliar a resolução espacial dos modelos climáticos regionais e globais e preencher lacunas nos dados espaciais das imagens (Figura 10). Outros estudos também tiveram resultados promissores na reprodução de padrões espaciais complexos, na melhoria da nitidez e reconstrução de imagens de sensoriamento remoto (MARIETHOZ, MCCABE e RENARD, 2012; YIN, MARIETHOZ e MCCABE, 2017; MALONE *et al.*, 2016), além de aplicações em imagens subterrâneas do solo obtidas a partir de técnicas geofísicas (MEERSCHMAN, VAN MEIRVENNE e VAN DE VIJVER, 2013; LINDE *et al.*, 2015).

Figura 10. Aplicação do DS para melhoria e reconstrução de uma imagem de temperatura (K) do verão no sudeste da Austrália (resolução de 50 km): (a) dados brutos e (b) simulação pelo DS.



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

Huang *et al.* (2013) exploraram os benefícios das unidades de processamento gráfico (*Graphics Processing Units - GPUs*) no desempenho do DS, chegando a reduzir o tempo de computação de 10 a 100 vezes em uma IT 3D. Também foi possível melhorar a reprodução dos padrões de conectividade de longo alcance na reconstrução de imagens de canais de areia, utilizando uma janela de busca com formato elipsoidal. Outros estudos também buscaram ampliar a capacidade do DS (REZAEE *et al.*, 2013; MEERSCHMAN, VAN MEIRVENNE e VAN DE VIJVER, 2013; ABDOLLAHIFARD e FAEZ, 2014).

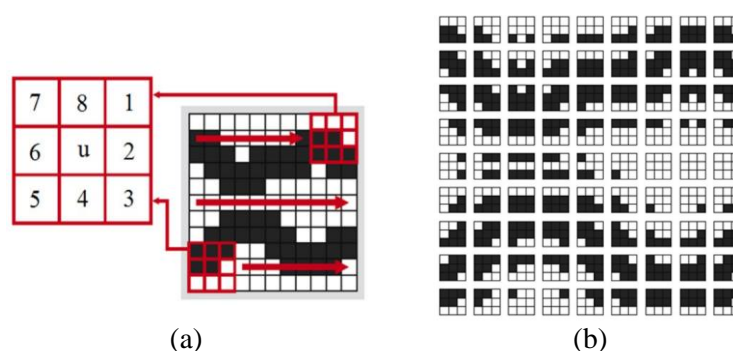
3.2.2.2 Algoritmos GMP baseados em Padrões (*Pattern-Based*)

Os algoritmos *Pattern-Based* introduziram uma nova abordagem quanto à utilização da IT como modelo conceitual. O SIMPAT (*SIMulation with PATterns*), realiza a busca por padrões considerando a IT “cortada em pedaços”, do tamanho da janela de busca (Figura 11b), onde cada “pedaço” é armazenado em um banco de dados de uma árvore de busca, e utilizado posteriormente nas imagens reproduzidas (ARPAT e CAERS, 2007). Em cada ponto da malha

de simulação, os vizinhos próximos são avaliados e um evento de dados correspondente é criado. Por meio deste padrão dos vizinhos próximos, uma busca é feita através dos “pedaços” armazenados na árvore de busca. O padrão mais similar é então atribuído à grade de simulação. Esse método de análise geoestatístico pode ser comparado a um quebra-cabeça, no qual os padrões são peças que precisam ser “remontadas” de forma aleatória, de acordo com certas restrições de similaridade (ARPAT, 2005). No entanto, um dos principais problemas relativos a essa abordagem é a complexidade computacional associada às buscas por similaridade, comparando o evento de dados com todos os padrões em uma IT. Isso leva a um desempenho ruim da CPU em comparação com outros algoritmos geoestatísticos (MARIETHOZ e CAERS, 2014). Além disso, os resultados produzidos podem apresentar uma semelhança considerável com a IT. Assim, este método pode subestimar a incerteza espacial (ZIEGEL e BEYER, 2006).

O FILTERSIM (*Filter-based Simulation*) segue o mesmo conceito do SIMPAT, incluindo uma nova forma de organização dos dados da IT, chamado de filtros lineares gerais. Os padrões extraídos de uma determinada IT são identificados por um vetor usando valores de pontuação do filtro (Figura 11a). Esses padrões são então classificados segundo médias ponderadas e agrupados em classes de padrões, de acordo com determinado critério de similaridade. Cada classe é resumida por um padrão nos critérios de pontuação do filtro, onde são designados pesos para estas distribuições. Estas classes são chamadas de protótipos de treinamento (ZHANG, SWITZER e JOURNAL, 2006).

Figura 11. Funcionamento do FILTERSIM: (a) identificação dos padrões extraídos da IT de acordo com filtros definidos e (b) IT “recortada” segundo determinada janela de busca.

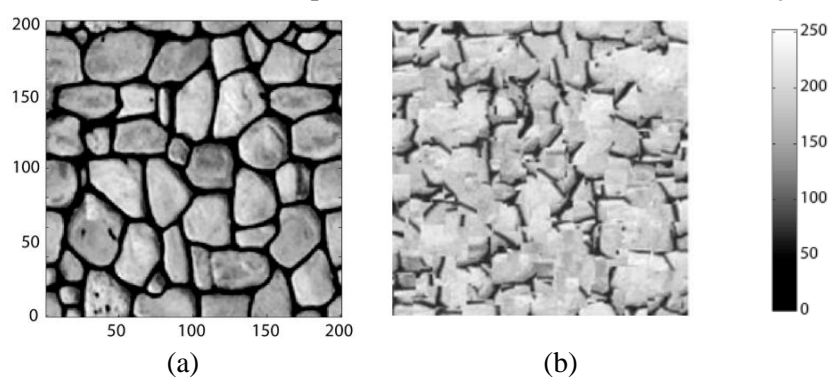


Fonte: Zhang, Switzer e Journal (2006).

A redução do espaço de busca trazida pelos filtros de padrões, a pré-classificação em determinados grupos e o armazenamento em uma estrutura de árvore de dados tornam o FILTERSIM um algoritmo rápido e razoável em termos de demanda de memória RAM, principalmente quando comparado aos baseados em pixels (MARIETHOZ e CAERS, 2014). Entretanto, a utilização de filtros lineares para classificação de padrões pode representar um

problema. Para Ziegel e Beyer (2006), a capacidade de transmitir toda a informação e variabilidade dos padrões da IT pode ser limitada. A Figura 12b exemplifica uma situação em que as reproduções obtidas se afastaram da realidade, sendo a IT a mesma apresentada na Figura 9a e novamente na Figura 12a.

Figura 12. Resultados obtidos pelo FILTERSIM: (a) IT e (b) simulação obtida.

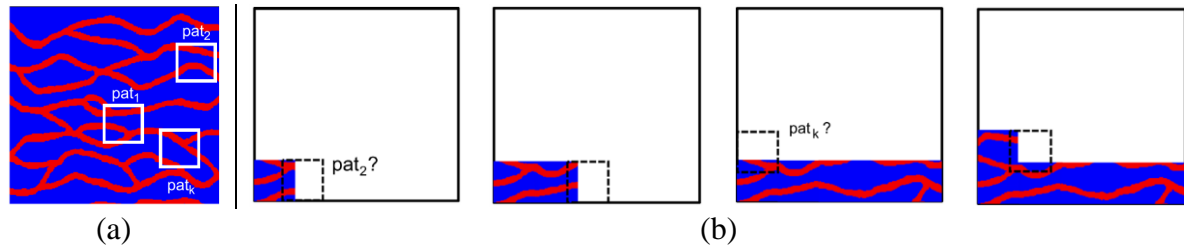


Fonte: Tahmasebi, Hezarkhani e Sahimi (2012).

Tahmasebi, Hezarkhani e Sahimi (2012) introduziram, por meio do CCSIM (*Cross Correlation based Simulation*), uma nova forma de análise dos dados de imagens de treinamento, chamada de região de sobreposição (*overlap region – OL*). Assim como os demais algoritmos deste grupo, o CCSIM preenche a malha de simulação por meio de conjunto de dados retirados da IT, conforme o tamanho de uma janela de busca (*template*). A região de sobreposição desempenha o papel que os vizinhos próximos possuem nos algoritmos baseado em pixels. A OL é uma extensão da janela de busca, ou *template*, ficando nos limites de suas dimensões. Segundo Tahmasebi, Sahimi e Caers (2014), a região OL fornece melhorias consideráveis à simulação, em termos de velocidade e reprodução de padrões, antecipando a identificação dos padrões já preenchidos na simulação, além de evitar descontinuidades nos resultados obtidos. Estas regiões são utilizadas para direcionar o “encaixe” entre os valores já preenchidos na simulação e aqueles encontrados na IT. A busca na IT é por um padrão que se sobreponha melhor, de acordo com alguma medida de similaridade calculada sobre a OL (ZIEGEL e BEYER, 2006). A Figura 13 mostra, de forma simplificada, como o preenchimento ocorre.

Tahmasebi, Sahimi e Caers (2014) adicionaram ao CCSIM uma análise de multi-escala (*Multi Scale MS-CCSIM*). Através deste artifício, a IT é reduzida conforme um fator de escala, em que os novos valores em cada pixel são obtidos por meio de uma interpolação. O objetivo da multiescala é diminuir o tempo de processamento e direcionar a busca para a identificação de melhores padrões, uma vez que a área de busca é reduzida.

Figura 13. Sequência de preenchimento pelo CCSIM: (a) IT e (b) sequência de simulação na malha utilizando a OL.



Fonte: Tahmasebi, Sahimi e Cares (2014).

Neste trabalho, considerando as características da imagem micro-CT utilizada como IT (resolução de 938×838 pixels com voxels isotrópicos de $26 \mu\text{m}$) foi adaptado um algoritmo baseado no método *Direct Sampling* para a reprodução dos padrões de abertura. Esta opção se baseou na capacidade dos algoritmos baseados em pixels de reproduzir, com melhor eficiência, escalas locais em modelos geológicos complexos (ZIEGEL e BEYER, 2006), na relevância do DS na GMP (DALY e MARIETHOZ, 2011) e sua implementação intuitiva (MEERSCHMAN *et al.*, 2013).

Para a caracterização e quantificação do escoamento de água em meios fraturados é necessário, além do conhecimento do padrão de distribuição de abertura, um modelo capaz de representar com fidelidade toda a complexidade deste fluxo.

3.3. MODELAGEM DO ESCOAMENTO EM FRATURAS

A utilização de modelos numéricos para simulação de fenômenos físicos, como o escoamento de água subterrânea, é uma forma prática de se obter informações e entendimento sobre a complexidade deste meio heterogêneo. Sua implementação consiste em representações discretas e finitas de grandezas contínuas, buscando a mínima diferença entre a realidade física e o modelo numérico implementado (STRACK, 1989).

3.3.1. Modelo das Placas Planas Paralelas

O modelo mais aplicado para quantificar o fluxo em meios fraturados consiste em simplificar a geometria da fratura em duas placas paralelas e planas, separadas por um valor de abertura. Por adotar tal simplificação, o modelo das Placas Planas Paralelas (PPP) tem sido muito usado para quantificar o escoamento de água através de fraturas (SCHMITTBUHL *et al.*, 2008; NOIRIEL, GOUZE e MADÉ, 2013). Este método baseia-se nas equações de Navier-Stokes (CARDENAS, SLOTTKE e KETCHAM, 2007), considerando um fluido incompressível e escoamento laminar (REIS, 2018). Para uma fratura com tal geometria (PPP),

a taxa volumétrica de escoamento é proporcional ao cubo da abertura entre as placas, tradicionalmente conhecida como Lei Cúbica (Equação 4):

$$Q = -\rho g \frac{a^3}{12\eta} \nabla\phi \quad (4)$$

Em que: Q é a taxa de escoamento volumétrica ou descarga ($L^3.T^{-1}$); ρ é a massa específica do fluido ($M.L^{-3}$); a é a largura da fratura (L), η é a viscosidade dinâmica do fluido ($F.T.L^{-2}$), e $\nabla\phi$ é o gradiente de carga causador do escoamento (L).

Entretanto, o uso de uma abertura constante para simular o escoamento em fraturas muitas vezes não é adequado. Apesar de alguns estudos afirmarem que o modelo PPP pode ser usado localmente para simulação do escoamento em meios onde a abertura da fratura é da ordem de milímetros (ORON e BERKOWITZ, 1998; WENDLAND e HIMMELSBACH, 2002), outros apontam limitações deste método. Sua validade é questionada principalmente quanto a desconsideração de toda a heterogeneidade do meio fraturado (NEUMAN, 2012), em que rugosidades e pontos de contato entre as paredes da fratura levam a valores de abertura variados (NOIRIEL, GOUZE e MADÉ, 2013). Esta simplificação limita a qualidade da caracterização do transporte de poluentes (ISHIBASHI *et al.*, 2014), da velocidade do escoamento (DIJK, BERKOWITZ e BENDEL, 1999) e do gradiente hidráulico (HAKAMI e LARSSON, 1996) em meios fraturados.

Outros modelos buscam considerar toda a complexidade do plano de uma fratura, embora, geralmente, a um grande custo computacional. Dentre eles, destacam-se os métodos de Diferenças Finitas (MDF) e Elementos Finitos (MEF), tradicionalmente aplicados ao problema de fluxo subterrâneo.

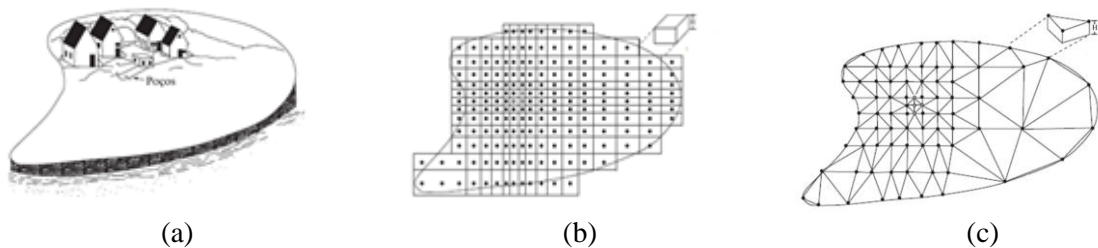
3.3.2. Método das Diferenças Finitas e dos Elementos Finitos

Os métodos das Diferenças Finitas (MDF) e Elementos Finitos (MEF) realizam a discretização da área estudada em uma malha de pontos onde variáveis, como cargas hidráulicas, são calculadas em todo o domínio de forma aproximada, assim como as condições de contorno e a própria equação diferencial. Em ambos os métodos, o domínio do escoamento é limitado. Condições de contorno são aplicadas apenas ao longo dos limites internos que representam fisicamente as características do aquífero (WANG e ANDERSON, 1995). Dentre as vantagens desses métodos, destaca-se a possibilidade de considerar a variabilidade do tensor de condutividade hidráulica na modelagem do escoamento. Além disso, a formulação é

ajustável para a modelagem de fluxo transiente, sendo suas soluções diretas e intuitivas (CODINA, 2002).

Entretanto, apesar de serem capazes de representar certos comportamentos do escoamento em fraturas, o MDF e MEF apresentam dificuldades em simular sistemas com grandes diferenças de escala, como por exemplo, a variação no tamanho das diversas fraturas em uma matriz de um aquífero, podendo limitar o detalhamento da discretização do domínio (WEATHERILL *et al.*, 2008). Tais situações requerem um número muito elevado de pontos compondo a malha de simulação, tornando o esforço computacional maior para a resolução do problema (WEATHERILL *et al.*, 2008). A Figura 14 mostra a disposição e as diferenças entre as malhas do MDF e MEF.

Figura 14. Disposição e a diferença entre as malhas do MDF e MEF: (a) fenômeno a ser modelado, (b) MDF e (c) MEF.



Fonte: Belcher e Welch (2006).

3.3.2.1 Método das Diferenças Finitas

No Método das Diferenças Finitas (MDF), o domínio é discretizado em uma estrutura retilínea, geralmente retangular. A formulação utilizada é de fácil entendimento e cálculo, onde as soluções aplicam os princípios da conservação de massa (TODSEN, 1971). Valores de potencial ou a carga hidráulica são calculados resolvendo a equação diferencial do fluxo, na forma de diferenças finitas através da malha (WANG e ANDERSON, 1995). O sistema de equações lineares formulado pode ser resolvido por uma variedade de técnicas numéricas, como por exemplo, pela iteração de Gauss-Seidel (MACCORMACK e CANDLER, 1989). A discretização em uma série de nós torna adequada a aplicação do MDF a problemas em que a condutividade hidráulica apresenta grande variabilidade espacial.

No entanto, o MDF possui algumas limitações. Embora a discretização das malhas seja simples, seu refinamento não é eficiente e não permite um maior detalhamento em torno de áreas de interesse pontuais, como poços, e nos limites de domínios irregulares. A modelagem de propriedades geológicas complexas é de difícil representação, principalmente se houver camadas descontínuas ou longas (STRACK, 1989). Segundo Lee *et al.* (2007), a presença de

gradientes acentuados na estratigrafia pode resultar em células desconectadas, causando problemas na execução do modelo. Outro desafio é a modelagem de propriedades de influência menor e locais dentro de um determinado fenômeno de escala maior, como por exemplo, valores de abertura dentro do plano de uma fratura. Nestas situações, é necessário adicionar um grande número de células na discretização, aumentando o esforço computacional requerido.

Dependendo da variabilidade de um fenômeno físico, o MDF realiza algumas aproximações. Considerando a condutividade hidráulica, por exemplo, são utilizadas apenas as principais componentes, K_{xx} , K_{yy} e K_{zz} , podendo limitar sua aplicação na modelagem de falhas e fraturas (LI, ZHOU e GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 2010). Entretanto, essa simplificação ainda garante sua aplicabilidade em simulações do fluxo subterrâneo. O MDF é amplamente utilizado por órgãos governamentais, principalmente através de *softwares* nele baseados, como o MODFLOW (GOMES e CASTRO, 2002).

3.3.2.2 Método dos Elementos Finitos

O Método dos Elementos Finitos (MEF) difere do MDF ao permitir uma discretização versátil dos domínios, com limites não retangulares, ao utilizar uma malha de elementos de forma variada, como triângulos. O uso de triângulos permite um refinamento mais eficiente em torno de elementos pontuais, como poços, e nos limites do fenômeno. Regiões de estratigrafia variável, com inclinações ou afinamentos (*pinch out*) são melhores detalhadas pelo uso de malhas triangulares (BAI *et al.*, 2002). Além disso, a equação diferencial não é resolvida diretamente como no MDF, mas sim substituída por uma formulação variacional (WANG e ANDERSON, 1995). O MEF fornece uma descrição mais detalhada de anisotropias, representando, por exemplo, todo o tensor de condutividade hidráulica. Entretanto, o MEF não garante a conservação de massa local (STRACK, 1989). Podem ocorrer valores de velocidades descontínuas nos limites do elemento, dificultando o traçado de linhas de fluxo (CORDES e KINZELBACH, 1992). O MEF também possui *softwares* para sua aplicação, como o FEFLOW. Este modelo é semelhante ao MODFLOW, em que as camadas discretizadas devem ser contínuas em todo o domínio (TREFRY e MUFFELS, 2007).

Uma alternativa aos métodos apresentados é o Método dos Elementos Analíticos (MEA). Neste método, não é necessária a discretização do domínio, sendo utilizadas soluções analíticas para a resolução da equação governante do fluxo, permitindo a simulação de características hidrogeológicas em diferentes escalas.

3.3.3. Método dos Elementos Analíticos (MEA)

O Método dos Elementos Analíticos (MEA) é um método numérico desenvolvido por STRACK (1989), baseado na sobreposição de equações analíticas. O MEA é utilizado na solução de problemas de fluxo subterrâneo (bidimensionais e tridimensionais), embora seja aplicável a qualquer situação que envolva campos vetoriais (STRACK, 2003). As primeiras aplicações do MEA são de 1980, em que foi feita a modelagem dos efeitos da hidrovia Tennessee-Tombigbee (EUA) nos níveis dos aquíferos próximos. No que se refere à sua importância e abrangência, vale citar sua utilização no desenvolvimento do modelo Nacional de Águas Subterrâneas holandês (*Dutch National Groundwater Model – NAGROM*) e no fluxo de água subterrânea nas regiões metropolitanas sob influência do rio Minnesota (EUA) (KRAEMER, 2007).

No MEA, elementos hidrogeológicos, como um rio, um poço ou uma fratura, são representados por elementos governados por expressões analíticas. Estes elementos podem ser círculos, elipsóides, polígonos, sendo definidos como soluções analíticas da equação de Laplace ou de Poisson, expressos em termos do potencial de descarga (STRACK, 1989). O potencial de descarga é um valor abstrato, determinado a partir da carga hidráulica.

Para utilizar o conceito de potencial, o MEA assume algumas condições na modelagem. Primeiro, o fluxo na direção vertical pode ser desconsiderado ao adotar a aproximação de Dupuit-Forchheimer (STRACK, 1999). Esta aproximação é útil para soluções em termos de descarga, sendo, por outro lado, uma aproximação grosseira em estimativas de cargas piezométricas onde o fluxo vertical é grande. A segunda é que o escoamento subterrâneo de água é incompressível, irrotacional, estacionário e satisfaz a lei de Darcy (HUNT, 2018). Além disso, a condutividade hidráulica é homogênea em toda a área de estudo, com exceção aos elementos analíticos. Juntamente com os potenciais de descarga, é possível obter uma função conjugada, representando as linhas de fluxo (ou de corrente) do escoamento, ortogonais às linhas equipotenciais (ALENCAR e WENDLAND, 2013). A simplificação do escoamento em um problema bidimensional torna a utilização de variáveis complexas adequadas, sendo que os elementos analíticos são formulados no plano complexo (HUNT, 2006). O potencial de descarga e as linhas de fluxo são reescritos em um potencial complexo, sendo os potenciais a parcela real.

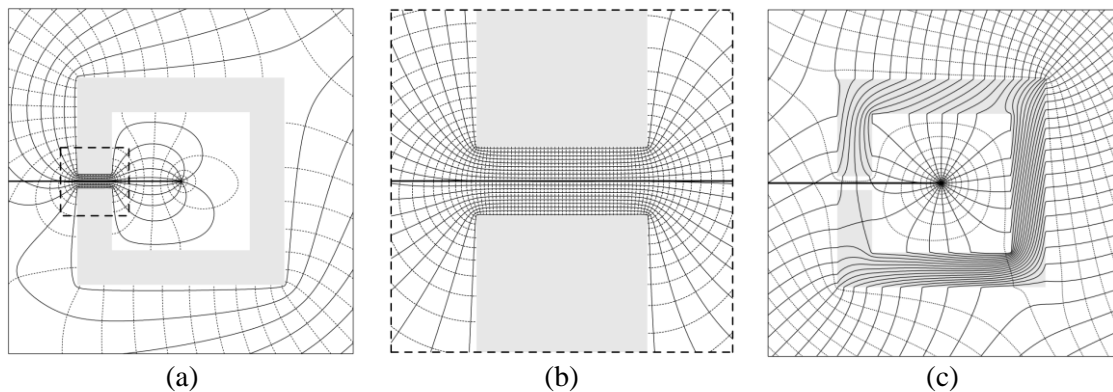
A solução das equações é obtida ao manter determinada condição de contorno nos limites de cada elemento analítico. Estas são formuladas em termos de descontinuidades ou “saltos” (diferentes valores de condutividade entre o interior e exterior do elemento) por meio

da utilização de Integrais de Cauchy (HUNT, 2006) ou de Funções de Legendre (STRACK, 2003). A continuidade do escoamento deve ser garantida nestes pontos de controle, em cada elemento do domínio. As condições de contorno, geralmente descritas por polinômios, são satisfeitas de forma aproximada por meio da minimização do erro entre os valores de potencial dentro e fora de cada elemento. Diferentes métodos podem ser aplicados, sendo os mais utilizados: o Método de Colocação (LE GRAND, 2013) e o dos Mínimos Quadrados (BARNES, STRACK e JANKOVIC, 1999). As equações analíticas dos diferentes tipos de elementos definem qual método utilizar.

O princípio da superposição pode ser utilizado, dada a linearidade da equação de Laplace (BAKKER e STRACK, 2003), nas soluções individuais. Segundo o princípio da superposição, um problema linear dividido em partes pode ser resolvido individualmente para, posteriormente, serem combinadas na solução final. As condições de contorno permitem a criação de sistemas lineares em que as incógnitas do problema são encontradas. Assim, o escoamento em um determinado ponto é obtido pela soma entre as soluções dos elementos analíticos e uma constante referente a um valor determinado de carga hidráulica nos limites do domínio (ALENCAR e WENDLAND, 2013). Para modelar as estruturas que afetam o fluxo em um aquífero, são utilizados elementos analíticos representados por linhas, como *line-doublets* (heterogeneidades delimitadas por polígonos), *line-dipole* e *line-sinks* (elementos de injeção e extração), inomogeneidades circulares e elipsóides, além de elementos pontuais para poços (BOICO, 2017).

As *line-doublets* são usadas para modelar o efeito no fluxo de variações/descontinuidades nas propriedades de um escoamento, além das alterações causadas por estruturas impermeáveis (BAKKER e STRACK, 2003). Estes elementos permitem delimitar uma inomogeneidade por um polígono (*line-doublets* conectadas nas extremidades) com condutividade hidráulica maior ou menor que a condutividade hidráulica do meio. A Figura 15a mostra a aplicação de *line-doublets* na modelagem de uma situação em que há uma parede impermeável em um fluxo confinado uniforme, juntamente com uma extração (elemento analítico pontual). A Figura 15c mostra o mesmo cenário com polígonos de condutividades diferentes de zero. As linhas pontilhadas representam os pontos de mesmo potencial de descarga (equipotenciais), enquanto as contínuas representam as linhas de fluxo.

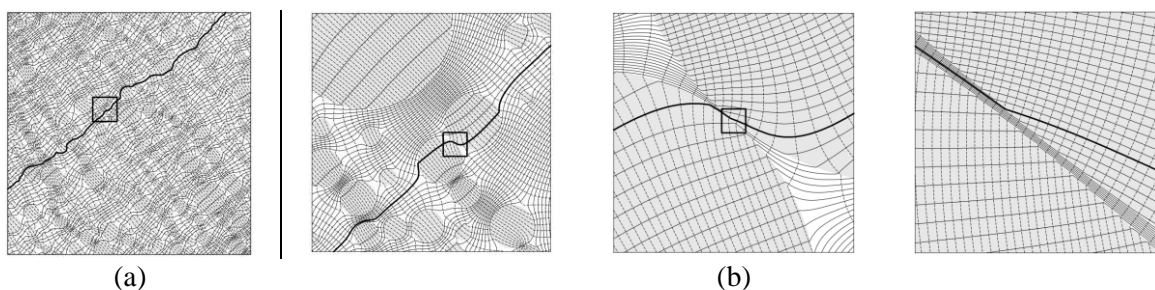
Figura 15. Exemplo da aplicação de *line-doublets* pelo MEA: (a) polígono de *line-doublets* de condutividade zero, (b) detalhe de uma das extremidades e (c) polígono com condutividades variadas.



Fonte: Janković e Barnes (1999).

As *line-dipoles* são úteis para modelar características de descargas de rede nulas, como drenos, em que não há bombeamento e sim fissuras estreitas preenchidas com material altamente permeável (GOMES e CASTRO, 2004). Situações em que se injeta e/ou extrai certa quantidade de água do aquífero são modeladas por elementos *line-sinks*, sendo geralmente aplicáveis na modelagem de fluxos, limites de rios e zonas de recarga (STRACK, 2003). As inomogeneidades circulares e elipsóides permitem um ajuste melhor das estruturas geográficas características e a heterogeneidade dos meios do escoamento subterrâneo (BAKKER e NIEBER, 2004). A Figura 16 mostra os resultados obtidos por Barnes e Janković (1999) a partir da aplicação de inomogeneidades circulares. A modelagem apresentada refere-se a um escoamento horizontal confinado utilizando 1000 inomogeneidades circulares, com valores variáveis de condutividade no interior dos elementos circulares, mantendo um valor uniforme no meio.

Figura 16. Efeito das inomogeneidades com condutividades variadas na modelagem do escoamento subterrâneo: (a) visão geral e (b) ampliações sucessivas de regiões delimitadas.



Fonte: Barnes e Janković (1999).

Pesquisas relacionadas ao MEA possuem destaque no âmbito internacional, abordando suas aplicações mais comuns (HUNT, 2006), como os efeitos de poços de bombeamento no fluxo de aquíferos (PATEL, ELDHO e RASTOGI, 2010; BADV e DERISZADEH, 2005), considerando otimização quanto aos limites extraídos e custos envolvidos (GAUR, CHAHAR

e GRAILLOT, 2011). Outros estudos buscaram melhorias nas formulações (KUHLMAN e NEUMAN, 2009; MAJUMDER e ELDHO, 2016; BAKKER e STRACK, 2003; MARIN, 2011), e *softwares* baseados no MEA, como o *Split* (MATOTT, RABIDEAU e CRAIG, 2006), com aplicação na melhoria o tratamento de contaminantes por bombeamento e na avaliação da vulnerabilidade de aquíferos (FREDRICK *et al.*, 2004). O GFLOW também utiliza o MEA em modelagens subterrâneas (DRIPPS, HUNT e ANDERSON, 2006).

No Brasil, Boico, Wendland e Batista (2018) modelaram o impacto da extração de água por poços no fluxo subterrâneo do Aquífero Guarani em Bauru/SP, considerando diferentes cenários (passado, presente, futuro), utilizando uma inomogeneidade circular, alcançando resultados satisfatórios de predição. Gomes e Castro (2005) e Batista (2006) também realizaram a modelagem em aquíferos. Battista, Wendland e Schulz (2007) incluíram na modelagem a interação com águas superficiais. Outros estudos modelaram os efeitos de poluentes no escoamento subterrâneo (BATISTA, PENNER E SCHUULZ, 2004). Marin (2011) desenvolveu um método matricial iterativo para a descrição de fraturas, utilizando elipsóides poligonais no MEA, sendo testado com sucesso em inomogeneidades circulares e poligonais. Hussain (2017) e Alencar e Wendland (2013) também buscaram melhorias na implementação do MEA. Já Gomes e Castro (2002) compararam o desempenho dos *softwares Split* (MEA) e MODFLOW (MDF) na modelagem de aquíferos.

Nesta pesquisa, a aplicação dos elementos analíticos buscou simular a estrutura dos experimentos com curvas de passagem de Lucas (2016), caracterizado por uma amostra de basalto com 100 mm de comprimento e 110 mm de diâmetro, com uma única fratura, isolada do meio externo nas laterais e faces superior e inferior, com exceção das aberturas para entrada e saída de fluxo. Optou-se pela utilização de *line-doublers* para a construção de polígonos, tanto para a representação do perímetro impermeável em torno da amostra, quanto para a diferenciação das regiões heterogêneas de abertura no fluxo da fratura. Para simular a injeção e extração das vazões do experimento, foram utilizados *line-sinks*. A seguir são apresentados os equacionamentos do MEA para estes elementos.

3.3.3.1 Equações básicas

O desenvolvimento das equações governantes do MEA adotam as seguintes condições (STRACK, 1999): o fluxo subterrâneo obedece a lei de Darcy; o escoamento na direção vertical é desconsiderado (aproximações de Dupuit-Forchheimer); o fluxo específico não varia ao longo da espessura saturada do aquífero; e a condutividade hidráulica é homogênea em todo o domínio, assumindo valores diferentes apenas no interior dos elementos analíticos.

Assim, as descargas específicas para escoamento bidimensional, isotrópico, irrotacional, são expressas pela Lei de Darcy, representadas pelas Equações 5 e 6:

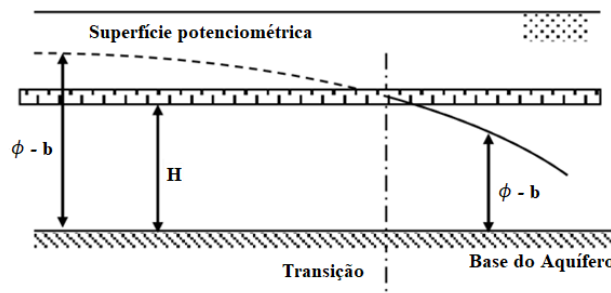
$$q_x = -K \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (5)$$

$$q_y = -K \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (6)$$

Nas quais: q é a descarga específica ($L^2/L.T$); K é a condutividade hidráulica (L/T); ϕ é a carga hidráulica no aquífero (L).

Considerando como exemplo para as deduções do equacionamento um fluxo em um aquífero, onde as propriedades para as situações confinada e não confinada são constantes, a espessura saturada é igual à cota da descarga hidráulica menos o nível de referência da base do aquífero. A Figura 17 representa as situações confinada e livre, onde b é a elevação da base do aquífero (L), $\phi - b$ é a espessura saturada h (L) para fluxo não confinado, e H (L) para fluxo confinado, sendo H a espessura do aquífero.

Figura 17. Aquífero com zona de transição entre confinado e livre.



Fonte: Alencar e Wendland (2013).

No escoamento confinado, à esquerda da transição (Figura 17), as descargas por unidade de largura ($L^3/L.T$) em ambas as direções podem ser descritas pelas Equações 7 e 8:

$$Q_x = Hq_x \quad (7)$$

$$Q_y = Hq_y \quad (8)$$

A partir das Equações 7 e 8, obtém-se as Equações 9 e 10:

$$Q_x = H \left(-K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} KH\phi \quad (9)$$

$$Q_y = H \left(-K \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = -\frac{\partial}{\partial y} KH\phi \quad (10)$$

De forma similar, para o escoamento livre, a direita da transição (Figura 17), as descargas são representadas pelas Equações 11 e 12:

$$Q_x = \phi q_x \quad (11)$$

$$Q_y = \phi q_y \quad (12)$$

De forma análoga, aplicando-se a Lei de Darcy, as descargas podem também ser indicadas pelas Equações 13 e 14.

$$Q_x = \phi \left(-K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{K\phi^2}{2} \quad (13)$$

$$Q_y = \phi \left(-K \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = -\frac{\partial}{\partial y} \frac{K\phi^2}{2} \quad (14)$$

As descargas podem ser representadas em termos de potencial de descarga (STRACK, 1999), igual ao termo dentro da derivada parcial, adicionada uma constante. O potencial para situação confinada de espessura H é descrito pela Equação 15. Em casos não confinados, a equação do potencial de descarga pode ser encontrada em Alencar e Wendland (2013).

$$\Phi = KH(\phi - b) - \frac{1}{2}KH^2 \quad \text{para } \phi > H \quad (15)$$

Assim, o vetor de descarga pode ser definido como:

$$Q_x = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (16)$$

$$Q_y = -\frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (17)$$

Para a situação em que não há recarga ou descarga, o balanço de massa pode ser descrito utilizando a Equação 18:

$$\frac{\partial Q_x}{\partial x} + \frac{\partial Q_y}{\partial y} = 0 \quad (18)$$

A Equação 18 pode então ser escrita em termos de potencial de descarga, ficando na forma da Equação de Laplace (Equação 19). O princípio da superposição pode então ser aplicado a esta equação diferencial linear.

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0 \quad (19)$$

As soluções são obtidas, conseqüentemente, em termos de potencial de descarga, e de uma função conjugada representando as linhas de fluxo do escoamento, ortogonais às linhas equipotenciais, sendo relacionadas pelas condições de Cauchy-Riemann (STRACK, 1989). A equação de Laplace (STRACK, 1999) pode ser escrita também em função das linhas de corrente (Equação 20):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 y^2} = 0 \quad (20)$$

Devido às propriedades das funções analíticas complexas com relação à equação de Laplace (STRACK, 1999), o potencial de descarga e a função de corrente podem ser representadas conjuntamente pelo potencial complexo (L^3/T) (Equação 21):

$$\Omega(z) = \Phi(z) + \Psi(z)i \quad (21)$$

Na qual um ponto qualquer é definido por uma variável complexa z . Assim, a parte real da Equação 21 representa o potencial de descarga, enquanto a parte imaginária representa as linhas de fluxo. A partir esta definição, o vetor descarga complexo W pode ser representado pela Equação 22 (JANKOVIC' e BARNES, 1999):

$$W = -\frac{\partial \Omega}{\partial z} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} + i \frac{\partial \Phi}{\partial y} = Q_x - iQ_y \quad (22)$$

3.3.3.2 Transformação de coordenadas

Em vista da extensa aplicação dos números complexos pelo MEA, equações básicas de transformação de coordenadas são apresentadas neste item. A relação funcional de uma variável complexa z e as variáveis x e y é dada por::

$$f(z) = f(x, y) \quad (23)$$

A transformação de variáveis complexas baseia-se no cálculo de Wirtinger, que permite a integração direta da equação de Laplace no sistema de coordenadas, conforme descrito em (HUSSAIN, 2017; STRACK, 2009). Considerando o sistema de coordenadas global com ponto z , definido por:

$$z = x + iy \quad (24)$$

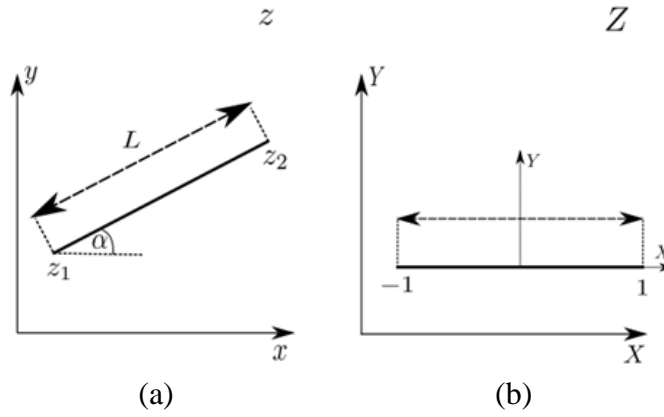
E o sistema de coordenadas local com ponto Z , definido por:

$$Z = X + iY \quad (25)$$

A transformação de uma linha no plano z com comprimento L com ângulo direcional α em relação ao eixo x , na qual z_1 e z_2 são os dois pontos no plano z que representam os pontos

inicial e final da linha, respectivamente (Figura 18a), no intervalo $[-1,1]$ é definida pela Equação 26:

Figura 18. Transformação da coordenada global z para local Z .



Fonte: Marin (2011).

$$Z = \frac{z - \frac{1}{2}(z_1 + z_2)}{\frac{1}{2}(z_2 - z_1)} \quad (26)$$

3.3.3.3 Line dipoles e line-doublets

O potencial complexo do *line-doublet* é obtido a partir do potencial complexo para um *line-dipole*, definida por uma distribuição contínua de dipolos ao longo de uma linha. O potencial complexo para um *line-dipole* em z é a função complexa com potencial de descarga e linha de fluxo com intensidades s (STRACK, 1989), conforme as Equações 27 e 28:

$$\Phi = \frac{s \cos(\theta - \alpha)}{2\pi r} \quad (27)$$

$$\Psi = -\frac{s \sin(\theta - \alpha)}{2\pi r} \quad (28)$$

Nas quais α é o ângulo direcional do *line-dipole* e θ expresso por (STRACK, 2017):

$$\theta = \arg \left[\frac{Z - 1}{Z + 1} \right] \quad -\pi \leq \theta < \pi \quad (29)$$

Sendo Z a posição no sistema de coordenadas local associado ao elemento de linha. O potencial complexo pode ser descrito por:

$$\Omega(z) = \frac{s \cos(\theta - \alpha) - i \sin(\theta - \alpha)}{2\pi r} = \frac{s e^{i\alpha}}{2\pi r e^{i\theta}} \quad (30)$$

O número complexo $re^{i\theta}$ representa o vetor de z_0 a z (STRACK, 1989), logo o potencial complexo para um *dipole* torna-se:

$$\Omega(z) = \frac{s}{2\pi} \frac{e^{i\alpha}}{z - z_0} \quad (31)$$

O potencial complexo para um *line-dipole* é obtido pela integração de um dipolo ao longo de uma linha. Substituindo s por $-\mu$, e z_0 por δ (STRACK, 1989), e considerando uma linha de comprimento L , com pontos z_1 e z_2 nas extremidades, e ângulo α em relação ao eixo x conforme mostrado na Figura 18, a integral da Equação 31 para um *line-dipole* é descrita como:

$$\Omega(z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{\mu e^{i\alpha}}{z - \delta} \partial \xi \quad (32)$$

Na qual μ é a distribuição de descarga e ξ é considerado $-\frac{L}{2}$ em z_1 e $\frac{L}{2}$ em z_2 , sendo estes os pontos nas extremidades do elemento. O número complexo δ denota um ponto na linha e em termos de ξ :

$$\delta = \xi e^{i\alpha} + \frac{1}{2}(z_1 + z_2) \quad (33)$$

Em que: $\partial \delta = e^{i\alpha} \partial \xi$. Portanto, a Equação 32 pode ser escrita como:

$$\Omega(z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{z_1}^{z_2} \frac{\mu}{z - \delta} \partial \delta \quad (34)$$

A linha pode ser definida no intervalo $[-1,1]$, conforme Equação 26 (coordenada local), assim como a variável adimensional ω :

$$\omega = \omega_1 + i\omega_2 = \frac{\delta - \frac{1}{2}(z_1 + z_2)}{\frac{1}{2}(z_2 - z_1)} \quad (35)$$

Na qual $z_2 - z_1 = Le^{i\alpha}$, ω assim como Z (Equação 26) é uma posição no sistema de coordenadas local associado ao elemento e z_1 e z_2 são os pontos nas extremidades. Considerando $\frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ o centro da linha de comprimento L conforme Figura 18, $z_2 - z_1$ representando o vetor de z_1 a z_2 e introduzindo a função $\mu = \mu(Z)$ que é analítica para todo Z finito, usando as variáveis Z e ω definidas nas Equações 26 e 35, a integral da Equação 34 no intervalo $-1 \leq x \leq 1$ é calculada por:

$$\Omega(Z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\mu(\omega)}{Z - \omega} \partial \omega \quad (36)$$

Somando e subtraindo $\mu(Z)$, a Equação 36 torna-se:

$$\Omega(Z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\mu(Z)}{Z-\omega} \partial\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\mu(Z) - \mu(\omega)}{Z-\omega} \partial\omega \quad (37)$$

Para a primeira integral, Z é constante e, portanto, a integração pode ser realizada, fornecendo:

$$\Omega(Z) = \frac{\mu(Z)}{2\pi} \ln \frac{Z-1}{Z+1} + \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\mu(Z) - \mu(\omega)}{Z-\omega} \partial\omega \quad (38)$$

A integral restante é analítica em $Z = \omega$, obtido a partir da expansão de $\mu(Z)$ em uma série de Taylor. Como a integral de uma função analítica é analítica, portanto, o segundo termo na Equação 38 também é analítico para todo Z e é representado simbolicamente como $p(Z)$ (STRACK, 1989). Assim, o potencial complexo para um *line-dipole* torna-se:

$$\Omega(Z) = \frac{\mu(Z)}{2\pi} \ln \frac{Z-1}{Z+1} + p(Z) \quad (39)$$

Na qual $p(Z)$ pode ser considerado como uma função de correção.

Line-doublets são usados para modelar características nos aquíferos onde o potencial é descontínuo e a função de fluxo é contínua. A condutividade hidráulica e o potencial “saltam” através do limite de um elemento, mas a carga hidráulica e a função de fluxo são contínuas. Como um *line-doublet* é uma distribuição contínua de dipolos ao longo de uma linha orientados perpendicularmente (STRACK, 1989), o potencial complexo usando a Equação 39 assume a forma:

$$\Omega(Z) = \frac{1}{2\pi i} \left(\lambda(Z) \ln \frac{Z-1}{Z+1} + p(Z) \right) \quad (40)$$

Na qual a função $\lambda(Z)$, chamada de função de salto (*jump function*) de ordem f , é um polinômio real ao longo do elemento e $p(Z)$ é o polinômio de correção de ordem $f-1$ que garante que $\Omega(Z)$ se aproxime de $\frac{1}{Z}$ próximo ao infinito (JANKOVIC´ e BARNES, 1999). A função de salto $\lambda(Z)$ pode ser aproximada pelos polinômios de Chebyshev, conforme a Teoria da aproximação (JANKOVIC´ e BARNES, 1999):

$$\lambda(Z) = \sum_{n=0}^N a_n T_n(Z) \quad (41)$$

Na qual a_n são coeficientes reais, T_n são polinômios de Chebyshev e N é a ordem da série de Chebyshev. A expressão dada é real ao longo do elemento (JANKOVIC' e BARNES, 1999), portanto, pode ser escrita na forma:

$$\lambda(X) = \sum_{n=0}^N a_n T_n(X) \quad (42)$$

A definição dos polinômios de Chebyshev por $T_n(\cos\theta) = \cos(n\theta)$ é utilizada na expansão da função de salto $\lambda(X)$ em uma série de cossenos de Fourier em termos de θ , onde $X = \cos\theta$ (JANKOVIC' e BARNES, 1999). Da mesma forma, polinômio de correção $p(Z)$ pode ser escrito na forma (MARIN, 2011):

$$p(Z) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{n-1} a_n Z^p \left(\frac{1^{n-p} - (-1)^{n-p}}{n-p} \right) \quad (43)$$

Portanto, o potencial complexo para um *line-doublet* torna-se:

$$\Omega(Z) = \frac{1}{2\pi i} \left[\sum_{n=0}^N a_n Z_n(Z) \ln \frac{Z-1}{Z+1} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{n-1} a_n Z^p \left(\frac{1^{n-p} - (-1)^{n-p}}{n-p} \right) \right] \quad (44)$$

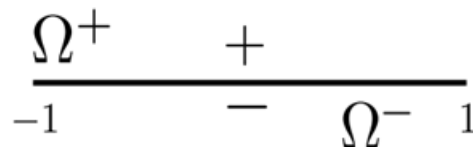
Na qual Z é definido pela equação 26.

Nas condições de contorno dos elementos analíticos, a carga hidráulica deve ser contínua na interface destes com o meio externo (STRACK, 1989):

$$\phi^+(\theta) = \phi^-(\theta) \quad (45)$$

Onde $\phi^+(\theta)$ é a carga hidráulica dentro do elemento e $\phi^-(\theta)$ a carga hidráulica fora do elemento, segundo θ (Equação 29). Os sinais + e - mostram os lados interno e externo de um elemento linha conforme Figura 19.

Figura 19. *Line-doublet* com a identificação dos lados interno e externo.



Fonte: Marin (2011).

Conforme citado anteriormente, a única componente do potencial complexo Ω para o elemento j que apresenta um “salto” é o potencial de descarga. Portanto, a condição de

continuidade da carga na borda do elemento j em termos de potencial de descarga Φ pode ser escrita como:

$$\frac{\Phi^+(\theta)}{K_j^+} = \frac{\Phi^-(\theta)}{K^-} \quad (46)$$

Na qual K_j^+ e K^- são as condutividades hidráulicas interna e externa de um *line doublet*. A parte real do potencial complexo Ω é descontínua e a parte imaginária é contínua através da interface ilustrada na Figura 19. Assim, os termos de ordem mais alta da série de Chebyshev são usados para criar o “salto” no potencial complexo através de um *line-doublet*, onde os demais termos são de correção (JANKOVIC´ e BARNES, 1999). A função $\ln \frac{Z-1}{Z+1}$ no próprio elemento é definida por:

$$\ln \frac{Z-1}{Z+1} = \begin{cases} \ln \left| \frac{X-1}{X+1} \right| + i\pi & \text{para } -1 < X < 1, \quad Y = 0^+ \\ \ln \left| \frac{X-1}{X+1} \right| - i\pi & \text{para } -1 < X < 1, \quad Y = 0^- \end{cases} \quad (47)$$

Como todos os termos de correção são reais ao longo do elemento e não contribuem para o potencial de descarga, no elemento os potenciais de descarga para os lados interno e externo serão (HUSSAIN, 2017):

$$\Phi(X, 0^+) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N a_n T_n(X) \quad (48)$$

$$\Phi(X, 0^-) = -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N a_n T_n(X) \quad (49)$$

O “salto” no potencial de descarga torna-se então:

$$\Delta\Phi(X) = \Phi(X, 0^+) - \Phi(X, 0^-) = \sum_{n=0}^N a_n T_n(X) \quad (50)$$

A função de fluxo é contínua ao longo do elemento devido à função apresentada na Equação 42, que não “salta” pelo elemento. As Equações 48 e 49 são usadas para determinar os coeficientes desconhecidos para os *line-doublets*.

A combinação dos potenciais de descarga de todos os *line-doublets* pode ser expressa pela Equação 51 a partir da Equação 46:

$$\frac{\Phi_{\neq j}^+(\theta) + \Phi_j^+(\theta)}{K_j^+} = \frac{\Phi_{\neq j}^-(\theta) + \Phi_j^-(\theta)}{K^-} \quad (51)$$

Na qual $\Phi_j^+(\theta)$ é o potencial de descarga na parte interna do *line-doublet* j , $\Phi_j^-(\theta)$ é o potencial de descarga na parte externa do *line-doublet* j e $\Phi_{\neq j}^+(\theta)$ é o potencial de descarga na parte interna de todos os demais *line-doublets*, enquanto $\Phi_{\neq j}^-(\theta)$ é o potencial de descarga na parte externa de todos os demais *line-doublets* exceto j . Uma vez que o potencial de descarga gerado pelos outros elementos é contínuo ao longo da borda do j -ésimo *line-doublet*, as condições de contorno podem ser escritas como:

$$K^- \Phi_j^+(\theta) - K_j^+ \Phi_j^-(\theta) = (K_j^+ - K^-) \Phi_{\neq j}(\theta) \quad (52)$$

A partir das Equações 48 e 49, o potencial de descarga pode ser escrito na forma:

$$\Phi^+(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta) = \frac{1}{2} a_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta) \quad (53)$$

$$\Phi^-(\theta) = -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta) = -\frac{1}{2} a_0 - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta) \quad (54)$$

Substituindo as Equações 53 e 54 na Equação 52:

$$\begin{aligned} & K^- \left(\frac{1}{2} a_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(n\theta) \right) - K_j^+ \left(-\frac{1}{2} a_0 - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(n\theta) \right) \\ &= (K_j^+ - K^-) \Phi_{\neq j}(\theta) \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} K^- a_0 + \frac{1}{2} K_j^+ a_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} K^- a_n \cos(n\theta) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} K_j^+ a_n \cos(n\theta) \\ &= (K_j^+ - K^-) \Phi_{\neq j}(\theta) \end{aligned} \quad (56)$$

Integrando de 0 a π a Equação 56:

$$\frac{1}{2} \int_0^{\pi} (K_j^+ + K^-) a_0 \partial\theta = \int_0^{\pi} (K_j^+ - K^-) \Phi_{\neq j}(\theta) \partial\theta \quad (57)$$

$$\pi (K_j^+ + K^-) a_0 = 2(K_j^+ - K^-) \int_0^{\pi} \Phi_{\neq j}(\theta) \partial\theta \quad (58)$$

$$a_0 = \frac{2}{\pi} \left(\frac{K_j^+ - K^-}{K_j^+ + K^-} \right) \int_0^{\pi} \Phi_{\neq j}(\theta) \partial\theta \quad (59)$$

Novamente, a partir da Equação 56, multiplicando ambos os lados por $\cos(m\theta)$, podemos reescrever como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}K^-a_0\cos(m\theta) + \frac{1}{2}K_j^+a_0\cos(m\theta) + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}K^-a_n\cos(n\theta)\cos(m\theta) \\ & + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}K_j^+a_n\cos(n\theta)\cos(m\theta) = (K_j^+ - K^-)\Phi_{\neq j}(\theta)\cos(m\theta) \end{aligned} \quad (60)$$

Integrando de 0 a π , e considerando $m = n$, após simplificação a Equação 60 pode ser escrita como:

$$\frac{\pi}{4}(K_j^+ + K^-)a_n = (K_j^+ - K^-)\int_0^{\pi}\Phi_{\neq j}(\theta)\cos(n\theta)\partial\theta \quad (61)$$

$$a_n = \frac{4}{\pi}\left(\frac{K_j^+ - K^-}{K_j^+ + K^-}\right)\int_0^{\pi}\Phi_{\neq j}(\theta)\cos(n\theta)\partial\theta \quad (62)$$

As Equações 59 e 62 são as equações utilizadas para a determinação dos coeficientes das séries de expansão e solução do fluxo considerando os elementos *line-doublets*.

As condições de contorno apresentadas são aplicadas em uma série de m pontos de controle em um determinado elemento j . Suas localizações podem ser definidas conforme a expressão (JANKOVIC´ e BARNES, 1999):

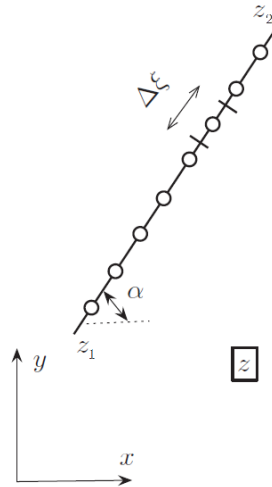
$$X_j^m = \cos\left(\frac{\pi(m - 0,5)}{M}\right) \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, M \quad (63)$$

Segundo Jankovic´ e Barnes (1999), o número de pontos de controle recomendado deve ser calculado por $\frac{M}{N+1} = 3$, onde N é o tamanho da série de Chebyshev. Valores acima desta relação não aumentam a precisão da solução.

3.3.3.4 Line-sinks

Os elementos *line-sinks* seguem deduções similares aos *line-dipoles* e *line-doublets*, podendo ser considerados uma linha reta uniformemente espaçada com n poços, conforme mostrado na Figura 20. A linha de comprimento L é inclinada em um ângulo α em relação ao eixo x , e os pontos nas extremidades são z_1 e z_2 . Todos os poços têm uma descarga $\sigma\Delta\xi$, onde $\Delta\xi$ é a distância entre os poços, e o m -ésimo poço está em $z = \delta m$. O potencial complexo correspondente é definido pela Equação 64.

Figura 20. Características do *line-sink*.



Fonte: Strack (2017).

$$\Omega(z) = \sum_{m=1}^n \frac{\sigma}{2\pi} \ln \frac{z - \delta_m}{\frac{1}{2}(z_2 - z_1)} \Delta\xi \quad (64)$$

Na qual a taxa de injeção por unidade de comprimento é $-\sigma$ (L^2/T). O valor de σ é positivo para extração. A soma se torna uma integral nos limites, para $\Delta\xi \rightarrow 0$ e $n \rightarrow \infty$:

$$\Omega(z) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{\sigma}{2\pi} \ln \frac{z - \delta}{\frac{1}{2}(z_2 - z_1)} \partial\xi \quad (65)$$

Na qual ξ é considerado $-\frac{L}{2}$ em z_1 e $\frac{L}{2}$ em z_2 , que são os pontos finais do elemento. Assim como para os *line-doublets*, o número complexo δ denota um ponto da linha, expressado conforme Equação 33. A linha pode ser definida no intervalo $[-1, 1]$ conforme os pontos definidos pelas Equações 26 e 35 (em que $z_2 - z_1 = Le^{i\alpha}$), sendo reais ao longo do elemento e que variam entre -1 em z_1 a $+1$ e z_2 . Assumindo também $\partial\xi = e^{-i\alpha}\partial\delta = \frac{1}{2}L\partial\Delta$, a Equação 64 pode ser escrita como:

$$\Omega(z) = \int_{-1}^{+1} \frac{\sigma}{2\pi} \ln(Z - \Delta) \frac{1}{2}L\partial\Delta \quad (66)$$

Onde substituindo $\partial\Delta$ por $-\partial(Z - \Delta)$:

$$\Omega(z) = -\frac{\sigma L}{4\pi} \int_{Z+1}^{Z-1} \ln(Z - \Delta) \partial(Z - \Delta) \quad (67)$$

Realizando a integral:

$$\Omega(z) = -\frac{\sigma L}{4\pi} [(Z + 1) \ln(Z + 1) - (Z - 1) \ln(Z - 1) - 2] \quad (68)$$

A Equação 68 representa o potencial complexo para um *line-sink* de taxa de extração σ e comprimento L , escrito em termos da variável complexa local Z .

3.3.3.5 Fluxo uniforme

A definição do fluxo uniforme para o sistema de coordenadas globais de intensidade Q_0 , formando um ângulo α_{unif} em relação ao eixo x , descrito em (STRACK, 1989), é dado por:

$$\Omega_{unif}(z) = -Q_0 z e^{-i\alpha_{unif}} + C \quad (69)$$

Na qual C é chamada de constante do ponto de referência e deve ser calculada em função da carga hidráulica no ponto de referência.

3.3.3.6 Método de solução

Jankovic' e Barnes (1999) usaram o Método Iterativo para resolver os sistemas lineares resultantes dos elementos analíticos, no qual não há a necessidade de construir explicitamente uma matriz, economizando memória do computador. Este método fornece uma convergência rápida para a maioria dos tipos de elementos de alta ordem (até 75). Hussain (2017) aplicou o Método Iterativo na solução de diferentes problemas como inomogeneidades circulares, inomogeneidades poligonais formadas por *line-doublets* e fraturas, encontrando dificuldades na convergência da solução, assim como Marin, Wendland e Strack (2012) e Marin (2011). Tais questões motivaram o desenvolvimento do algoritmo de solução pelo Método Matricial para satisfazer as condições de contorno no problema específico abordado nesta pesquisa. Resultados satisfatórios obtidos por Hussain (2017) e Marin (2011) na aplicação do método matricial com elementos poligonais também motivaram esta escolha. A formulação matricial ainda permite que algoritmos de solução iterativos possam ser usados, como Gauss-Seidel. Entretanto, o custo computacional em termos de tempo de processamento e memória devem ser avaliados para um número significativo de elementos analíticos, uma vez que o método matricial necessita que a matriz seja construída completamente e envolve pelo menos uma inversão de matriz (MARIN, 2011).

4. MATERIAIS E MÉTODOS

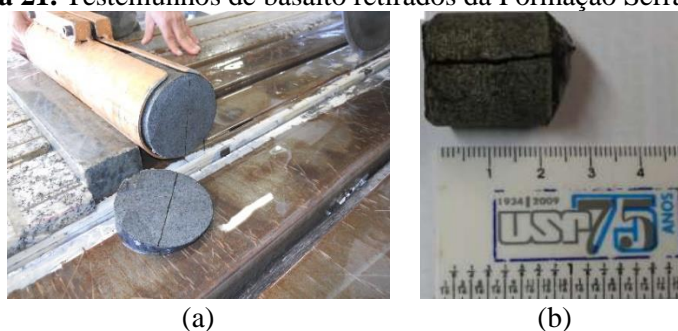
A metodologia desenvolvida foi dividida em duas etapas principais: a primeira etapa corresponde ao uso de uma imagem 3D de micro-CT como imagem de treinamento (IT) para reprodução dos padrões heterogêneos do interior de uma fratura. Nessa etapa, foi desenvolvido um algoritmo GMP baseado no *Direct Sampling*. A segunda etapa compreende a simulação do

escoamento pelo Método dos Elementos Analíticos (MEA), para a caracterização e quantificação do escoamento preferencial no plano da fratura e comparação com os fenômenos explorados experimentalmente por Lucas (2016).

4.1. IMAGEM DE TREINAMENTO (IT)

Entre 2012 e 2015, foi desenvolvido o projeto de doutorado “Escoamento água e transporte solutos em aquíferos fraturados: Investigação laboratorial e numérica” financiado pelo CNPq Universal nº 481477/2012-8 (LUCAS, 2016). Nesse projeto, iniciaram-se os estudos, em escala de laboratório, sobre escoamento de água e transporte de contaminantes no Aquífero Serra Geral (ASG). Foram retirados testemunhos indeformados de basalto da Formação Serra Geral em uma área de afloramento próxima à cidade de São Carlos-SP. Foram retiradas amostras de duas dimensões diferentes. A primeira foi coletada e retificada em formato cilíndrico (Figura 21a), com aproximadamente 10 cm de comprimento e 11 cm de diâmetro, com uma única fratura orientada verticalmente e seccionando todo o comprimento. Nesta amostra, foram realizadas várias injeções de Fluoresceína de Sódio (Uranina, CI: 45350) no plano da fratura. As concentrações relativas do traçador foram monitoradas em função do tempo e representadas por meio de curvas de passagem (*breakthrough curves*) (LUCAS, 2016). O segundo testemunho se refere a mesma fratura da primeira amostra, porém com dimensões de 2,8 cm de comprimento e 2,4 cm de diâmetro (Figura 21b), a qual foi submetida a microtomografia de raios-X (micro-CT).

Figura 21. Testemunhos de basalto retirados da Formação Serra Geral.

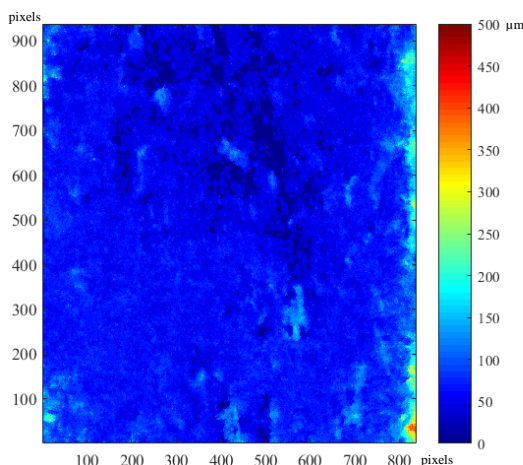


Fonte: Lucas (2016).

A imagem 3D de micro-CT obtida por Lucas (2016) é apresentada na Figura 22. Esta foi utilizada como IT para a reprodução dos padrões de distribuição aleatórios das aberturas de uma fratura. A resolução da IT é de 938 por 838 pixels, com dimensão espacial de 26 μm . Os valores das aberturas estão predominantemente entre o intervalo de 0 e 300 μm , com algumas regiões isoladas possuindo aberturas entre 400 e 450 μm , conforme a escala de cores à direita na Figura 22. O valor médio das aberturas e desvio-padrão foi estimado em $117,21 \pm 47,40 \mu\text{m}$

e o coeficiente de variação igual a 0,40. O volume da fratura, calculado com a abertura mecânica, foi de 1,42 mL.

Figura 22. Campo de abertura da fratura (amostra de 2,8×2,4 cm) representado em resolução 938×838 pixels. A escala de cores indica ausência de abertura (valor 0 μm) e máxima abertura (500 μm).



Fonte: Lucas (2016).

O algoritmo GMP desenvolvido e aplicado a imagem micro-CT foi o *Direct Sampling*.

4.2. ALGORITMO *DIRECT SAMPLING* (DS)

O objetivo do método DS é simular a função de probabilidade acumulada de uma variável aleatória de valor $Z(x)$ (Equação 3). Os dados de entrada são as dimensões da malha de simulação, cujo os pontos são nomeados por x e valor $Z(x)$, e a IT, cujos pontos são nomeados por y com valores $Z(y)$. Em situações onde são pré-definidos dados condicionais $\{Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)\}$, estes também são informados como dados de entrada na malha de simulação.

Além disso, os parâmetros do DS a serem estipulados são: o número de vizinhos próximos n , o critério de diferença máxima entre a simulação e a IT t , e a fração máxima da IT a ser analisada (“escaneada”) f . O princípio de funcionamento do algoritmo é baseado em Mariethoz (2009) e as etapas do código desenvolvido estão descritas na sequência.

1º - Na malha de simulação, é escolhida aleatoriamente a sequência de pontos x que serão preenchidos, armazenadas as informações referentes à sua localização em um vetor;

2º - Para cada localização no vetor:

a- É realizada uma busca pelos n vizinhos próximos $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ ao ponto x na malha de simulação que possuem valor já atribuído, seja pelo passo anterior da simulação ou definido por dados condicionais. Para o primeiro ponto a ser simulado, caso não

sejam utilizados dados condicionais, não existem vizinhos próximos. Assim, o algoritmo escolhe aleatoriamente um ponto na IT e atribui o valor $Z(y)$ para $Z(x)$ na malha de simulação, e segue para o próximo ponto.

- b- São calculadas e armazenadas as distâncias entre o ponto a ser simulado e os n vizinhos próximos:

$$L = \{h_1, h_2, \dots, h_n\} = \{x_1 - x, x_2 - x, \dots, x_n - x\}$$

Definindo assim a vizinhança do ponto x :

$$N(x, L) = \{x + h_1, x + h_2, \dots, x + h_n\}$$

- c- São armazenados em um vetor os valores das variáveis de interesse em todos os pontos da vizinhança selecionados:

$$dN(x, L) = \{Z(x + h_1), Z(x + h_2), \dots, Z(x + h_n)\} = \{Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)\}$$

- d- Cria-se uma janela de busca na IT. Suas dimensões são definidas de acordo com os valores máximos calculados e armazenados no vetor L em cada direção. Isto garante que, durante a busca por um padrão de configuração espacial similar, todos os vizinhos próximos a um ponto avaliado estejam dentro da janela de busca.

- e- Aleatoriamente é escolhido um ponto y dentro da janela de busca na IT. Para cada ponto avaliado o seguinte processo é realizado:

- I. É feita uma busca pelo padrão de dados $dN(x, L)$ na IT, considerando a partir do ponto y as mesmas distâncias e orientação dos vizinhos próximos selecionados na malha de simulação. Um vetor com os valores avaliados $dN(y, L)$ na IT é criado da mesma forma que no item c-
- II. Calcula-se a diferença entre o conjunto de dados na malha de simulação $dN(x, L)$ e aqueles encontrados e em avaliação na IT $dN(y, L)$. O cálculo da diferença $D\{dN(x, L), dN(y, L)\}$ é realizada pela Equação 70 (MARIETHOZ, RENARD e STRAUBHAAR, 2010):

$$D\{dN(x, L), dN(y, L)\} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Z(x_i) - Z(y_i)|}{d_{m\acute{a}x}} \quad (70)$$

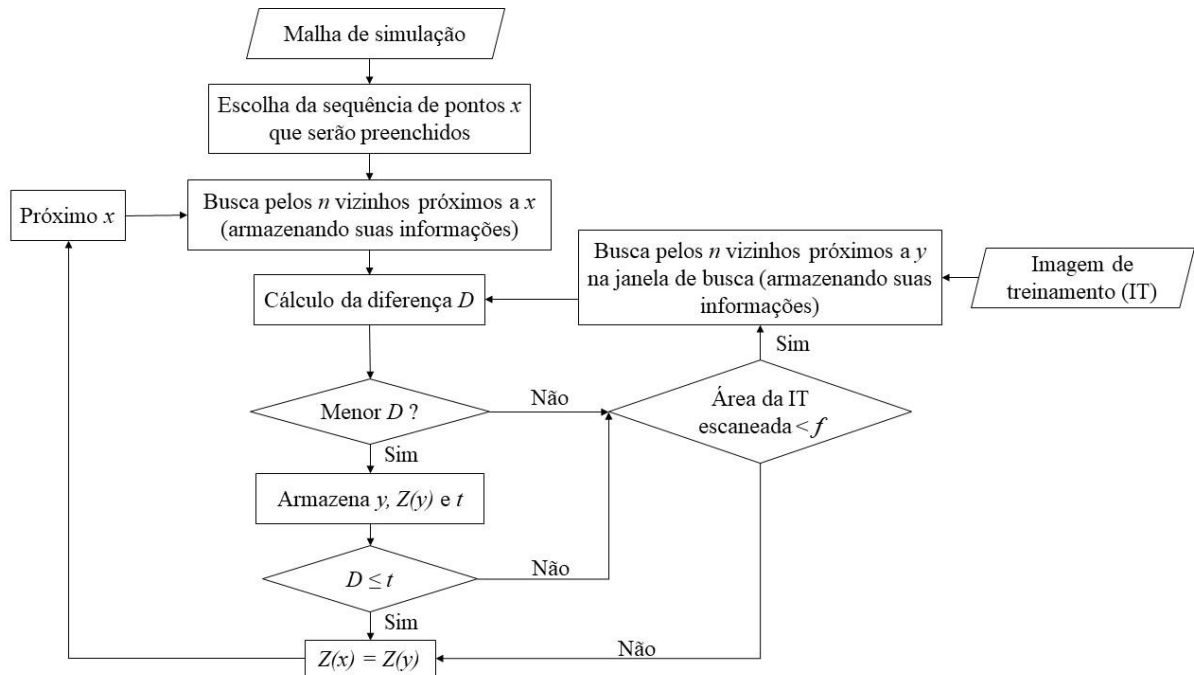
Na qual:

$$d_{m\acute{a}x} = m\acute{a}x_{y \in IT} Z(y) - \min_{y \in IT} Z(y) \quad (71)$$

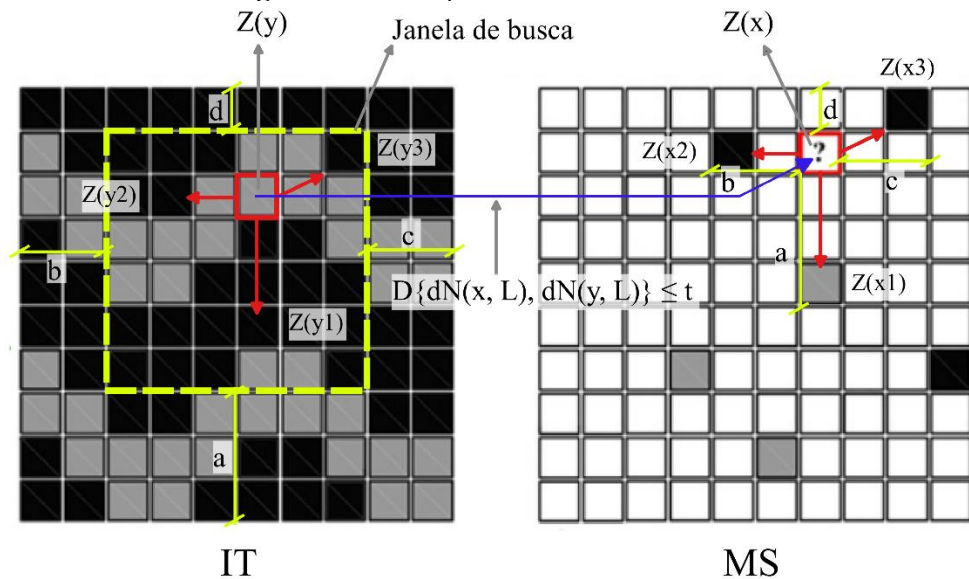
- III. Se $D\{dN(x, L), dN(y, L)\}$ for menor que o limite de aceitação t , o valor $Z(y)$ é amostrado e atribuído a $Z(x)$.
- IV. Para uma situação onde $D\{dN(x, L), dN(y, L)\}$ seja maior que t , mas o menor obtido até o momento, é armazenado seu respectivo valor, assim como os valores $Z(y)$. Esta etapa consiste numa situação onde não são encontrados padrões similares segundo o critério t na janela de busca e se o número de iterações do loop I-III exceder determinada fração f do tamanho da IT. Neste caso, o algoritmo atribui a $Z(x)$ o valor de $Z(y)$ referente ao ponto y com a menor $D\{dN(x, L), dN(y, L)\}$.

As Figuras 23 e 24 mostram de forma resumida o funcionamento do algoritmo DS. Na Figura 23 é apresentado o fluxograma das etapas descritas anteriormente. A Figura 24 ilustra o preenchimento de um ponto na MS, onde são identificados os três vizinhos próximos ao ponto a ser simulado (indicação “?”), armazenado os valores das variáveis $\{Z(x_1), Z(x_2), Z(x_3)\}$ e suas distâncias (a, b, c e d), utilizadas para a criação da janela de busca. Um ponto aleatório é então selecionado na janela de busca na IT, realizando a procura pela mesma configuração dos vizinhos próximos na IT ($\{Z(y_1), Z(y_2), Z(y_3)\}$). A diferença entre os vizinhos é então realizada e caso satisfaça o critério de similaridade é atribuído então o valor avaliado na IT a malha de simulação.

O algoritmo baseado no DS foi implementado em linguagem Python. As reproduções obtidas foram avaliadas qualitativamente pelas métricas estatísticas histograma, variograma (NUSSBAUMER *et al.*, 2020) e função conectividade (PARDO-IGÚZQUIZA e DOWD, 2003). A descrição do algoritmo da função conectividade é feita no Anexo I, sendo sua escolha baseada na aplicabilidade do algoritmo (RODRIGUEZ *et al.*, 2021; MORALES RODRIGUEZ, 2021) e na disponibilidade de um código aberto.

Figura 23. Fluxograma do método DS.

Fonte: adaptada de Yin, Mariethoz e McCabe (2017).

Figura 24. Ilustração do método DS.

Fonte: adaptada de Rezaee *et al.* (2013).

4.3. ALGORITMO MEA – LINE DOUBLETS

4.3.1. Matriz de Solução

Os coeficientes desconhecidos dos elementos analíticos *line-doublets* podem ser calculados nas Equações 59 e 62, reescritas na forma:

$$a_{i,n} = P_{i,n} \int_0^\pi \Re(\Omega_T(\theta_i)) \cos(n\theta) \partial\theta_i \quad (72)$$

Ou

$$a_{i,n} = P_{i,n} \int_0^\pi \Phi_{\neq j}(\theta_i) \cos(n\theta) \partial\theta_i \quad (73)$$

Em que conforme Equação 74:

$$P_{i,n} = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left(\frac{K_j^+ - K}{K + K_j^+} \right) & \text{para } n = 0 \\ \frac{4}{\pi} \left(\frac{K_j^+ - K}{K + K_j^+} \right) & \text{para } n > 0 \end{cases} \quad (74)$$

Na qual se calcula o n -ésimo coeficiente desconhecido para o *line-doublet* i , onde Ω_T é a combinação do potencial complexo de todos os elementos. O potencial de descarga $\Phi_{\neq j}$ é a parte real da soma dos potenciais complexos de todos os outros elementos presentes no sistema, incluindo o fluxo regional uniforme dado pela Equação 68 e *line sinks* (Equação 68). A Equação 72 dá origem a um conjunto de equações lineares resolvidas pelo Método Matricial. A forma matricial é construída a partir da Equação 75 para o cálculo dos coeficientes desconhecidos dos *line-doublets*:

$$Ax = b \quad (75)$$

A matriz A é construída a partir da expansão da série de potências do potencial dos *line-doublets*. O vetor b possui valor conhecido e resulta da contribuição do escoamento uniforme e dos *line-sinks*, e x é o vetor de coeficientes desconhecidos de cada elemento e um termo constante.

Em um sistema de inomogeneidade poligonal com M *line-doublets* formando um polígono fechado, um campo de fluxo uniforme e um *line-sink*. A expressão utilizada para calcular os coeficientes desconhecidos para o elemento i usando a Equação 72 é:

$$a_{i,n} = P_{i,n} \sum_{j \neq 1}^M \int_0^\pi \Re(\Omega_j(Z_{j,i}(\theta_i))) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \\ + P_{i,n} \int_0^\pi \Re(\Omega_{f. unif}(\theta_i) + \Omega_{l. sink}(\theta_i)) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \quad (76)$$

Os potenciais complexos $\Omega_{f.unif}$ e $\Omega_{l.sink}$ são definidos nas Equações 69 e 68. Reescrevendo a Equação 76 como:

$$\begin{aligned}
& \frac{a_{i,n}}{P_{i,n}} - \sum_{j \neq 1}^M \int_0^\pi \Re(\Omega_j(Z_{j,i}(\theta_i))) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i - \int_0^\pi \Re(C) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \\
& = \int_0^\pi \Re(\Omega_{f. unif}(\theta_i) + \Omega_{l. sink}(\theta_i)) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \tag{77}
\end{aligned}$$

Utilizando a Equação 77:

$$\begin{aligned}
& \frac{a_{i,n}}{P_{i,n}} - \sum_{j \neq 1}^M \int_0^\pi \Re \left[\frac{1}{2\pi i} \left(\sum_{m=0}^N a_{j,m} Z^m \ln \frac{Z-1}{Z+1} + \sum_{m=1}^\infty \sum_{p=0}^{m-1} a_{j,m} Z^p \left(\frac{1^{m-p} - (-1)^{m-p}}{m-p} \right) \right) \right] \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \\
& - \int_0^\pi \Re(C) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i = \int_0^\pi \Re(\Omega_{f. unif}(\theta_i) + \Omega_{l. sink}(\theta_i)) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \tag{78}
\end{aligned}$$

Reorganizando os coeficientes desconhecidos:

$$\begin{aligned}
& \frac{a_{i,n}}{P_{i,n}} - \sum_{j \neq 1}^M a_{j,0} \int_0^\pi \Re \left(\frac{1}{2\pi i} \ln \frac{Z-1}{Z+1} \right) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \\
& - \sum_{j \neq i}^M \sum_{m=1}^N a_{j,m} \int_0^\pi \Re \left[\frac{1}{2\pi i} Z^m \ln \frac{Z-1}{Z+1} \right. \\
& \left. + \sum_{p=0}^{m-1} \frac{1}{2\pi i} Z^p \left(\frac{1^{m-p} - (-1)^{m-p}}{m-p} \right) \right] \cos(n\theta_i) \partial\theta_i - \int_0^\pi \Re(C) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \\
& = \int_0^\pi \Re(\Omega_{f. unif}(\theta_i) + \Omega_{l. sink}(\theta_i)) \cos(n\theta_i) \partial\theta_i \tag{79}
\end{aligned}$$

As dimensões da matriz A são $M \times N_{elem} + 1$ linhas, assim como colunas, ou seja, $A_{(M \times N_{elem} + 1) \times (M \times N_{elem} + 1)}$, na qual M é o número total de elementos analíticos *line-doublets*, N_{elem} é a ordem da série de expansão e o termo adicional C é necessário para o cálculo da constante. A forma geral da matriz para dois elementos analíticos é apresentada a seguir:

$$A = \begin{bmatrix}
\frac{1}{P_{1,0}} \int_0^\pi F_{1,0}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_1) \cos(0) \partial\theta_1 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(0) \partial\theta_1 \\
\int_0^\pi F_{1,0}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \frac{1}{P_{1,1}} \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_1) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 \\
\int_0^\pi F_{1,0}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \frac{1}{P_{1,2}} \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_1) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 \\
\int_0^\pi F_{1,0}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \frac{1}{P_{2,0}} \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_2) \cos(0) \partial\theta_2 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(0) \partial\theta_2 \\
\int_0^\pi F_{1,0}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \frac{1}{P_{2,1}} \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_2) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 \\
\int_0^\pi F_{1,0}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,1}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{1,2}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,0}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi F_{2,1}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \frac{1}{P_{2,2}} \int_0^\pi F_{2,2}(\theta_2) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 & \int_0^\pi \Re(C) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 \\
F_{1,0}(z_0) & F_{1,1}(z_0) & F_{1,2}(z_0) & F_{2,0}(z_0) & F_{2,1}(z_0) & F_{2,2}(z_0) & 1
\end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} a_{1,0} \\ a_{1,1} \\ a_{1,2} \\ a_{2,0} \\ a_{2,1} \\ a_{2,2} \\ C \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(0) \partial\theta_1 \\ \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(\theta_1) \partial\theta_1 \\ \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(2\theta_1) \partial\theta_1 \\ \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(0) \partial\theta_2 \\ \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(\theta_2) \partial\theta_2 \\ \int_0^\pi \Re(\Omega_f. unif + \Omega_l. sink) \cos(2\theta_2) \partial\theta_2 \\ \Phi_0 \end{bmatrix}$$

Na qual $F_{i,n}(\theta_i) = \Re(\Omega_i(Z_i(\theta_i)))$ é o potencial complexo da inhomogeneidade i , n é a ordem da série de expansão, Φ_0 é a carga hidráulica no ponto de referência z_0 e C a constante.

Os valores de condutividade hidráulica na fratura foram obtidos a partir da Lei Cúbica, cuja dedução das equações é apresentada no Anexo II. A configuração do modelo conceitual do MEA para simular a estrutura do experimento de bancada desenvolvido por Lucas (2016), utilizando *line-doublets* e *line-sinks*, é apresentado de forma esquemática no item 5.2 - Figura 32.

4.3.2. Método de Gauss-Seidel

O teste de convergência da solução foi realizado utilizando o método iterativo de Gauss-Seidel. Assim, a matriz A da Equação 75 foi decomposta em:

$$A = D + U + L \quad (80)$$

Na qual L é a matriz triangular inferior sem incluir a diagonal, U a matriz triangular superior sem incluir a diagonal, e D a matriz diagonal. A partição de Gauss-Seidel (VENKATESHAN e SWAMINATHAN, 2014) é dada por:

$$R = D + L \quad (81)$$

$$T = -U \quad (82)$$

$$A = R - T \quad (83)$$

Com esta partição, a Equação 75 pode ser resolvida aplicando o particionamento no sistema linear:

$$x^{k+1} = R^{-1}Tx^k + R^{-1}b \quad (84)$$

Na qual k é o contador da iteração. O raio espectral da matriz $R^{-1}T$ indica possibilidade de convergência do esquema iterativo de solução. O raio espectral é definido como (GENE; CHARLES, 1996):

$$\rho(G) = \max (\lambda_i) \quad (85)$$

No qual λ_i são os autovalores de G , convergindo para valores menores que 1.

Quando implementada, a aproximação explícita pode ser utilizada:

$$x^{k+1} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{i,j}x_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{i,j}x_j^k \right) \quad (86)$$

4.3.3. Campo de velocidades

Uma vez calculados os valores dos coeficientes a_n é possível estimar, juntamente com os potenciais de descarga, os campos de velocidade. A partir da derivada complexa de Ω são obtidos os campos vetoriais de descarga em ambas as direções (JANKOVIĆ E BARNES, 1999), expressos por:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial z} = -W(z) = Q_x - iQ_y \quad (87)$$

Em escoamentos confinados, conforme item 3.3.3.1, a descarga Q em uma direção pode ser descrita pela velocidade de Darcy:

$$q_x = -k \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{Q_x}{H}; \quad q_y = -k \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{Q_y}{H} \quad (88)$$

A qual permite-se estimar a velocidade média em um meio de acordo com a porosidade efetiva n_e :

$$v_x = \frac{q_x}{n_e}; \quad v_y = \frac{q_y}{n_e} \quad (89)$$

Ao se assumir que a condutividade hidráulica em uma fratura pode ser estimada pela Lei Cúbica, a qual adota o modelo das Placas Plana Paralelas, pode se atribuir a porosidade efetiva o valor 1, onde a velocidade de Darcy corresponde a própria velocidade média em determinada abertura (BODIN, DELAY e DE MARSILY, 2003).

Assim, conhecendo os potenciais complexos dos elementos que compõem o escoamento na situação analisada (itens 3.3.3.3, 3.3.3.4 e 3.3.3.5), foi possível estimar o campo de velocidades em função da soma das derivadas complexas de cada potencial complexo Ω .

Para o fluxo uniforme (Equação 68), $W(z)$ foi definida por:

$$-\frac{\partial \Omega_{unif}}{\partial z} = -Q_0 e^{-i\alpha} \quad (90)$$

A descarga para um elemento *line-sinks* de extração (Equação 68), pode ser descrita por:

$$-\frac{\partial \Omega_{LS}}{\partial z} = \frac{\sigma L}{4\pi} \left[\left(\frac{2}{z_{S2} - z_{S1}} \right) (\ln(Z_s + 1) + 1) - \left(\frac{2}{z_{S2} - z_{S1}} \right) (\ln(Z_s - 1) + Z_s) \right] \quad (91)$$

$$-\frac{\partial \Omega_{LS}}{\partial z} = \frac{\sigma L}{4\pi} \left(\frac{2}{z_{S2} - z_{S1}} \right) [(\ln(Z_s + 1) + 1) - (\ln(Z_s - 1) + Z_s)] \quad (92)$$

Na qual Z_s é determinada pela Equação 26, e z_{si} conforme Figura 20.

Os elementos *line-doublets*, conforme Equação 44, na qual Z também é definido pela Equação 26 e z_i conforme Figura 18, $W(z)$ foi deduzida como:

$$-\frac{\partial \Omega_{LD}}{\partial z} = \frac{1}{2\pi i} \left[\sum_{m=1}^N m \cdot a_m Z^{m-1} \left(\frac{2}{z_2 - z_1} \right) \ln \frac{Z-1}{Z+1} + a_m Z^m \left(\frac{Z-1}{Z+1} \right) \frac{4}{(Z+1)^2 (z_2 - z_1)} \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{m-1} p \cdot a_m Z^{p-1} \left(\frac{1^{m-p} - (-1)^{m-p}}{m-p} \right) \left(\frac{2}{z_2 - z_1} \right) \right] \quad (93)$$

Reescrevendo a Equação 93:

$$-\frac{\partial \Omega_{LD}}{\partial z} = \left(\frac{2}{z_2 - z_1} \right) \frac{1}{2\pi i} \left[\sum_{m=1}^N m \cdot a_m Z^{m-1} \ln \frac{Z-1}{Z+1} + a_m Z^m \left(\frac{Z-1}{Z+1} \right) \frac{2}{(Z+1)^2} \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{m-1} p \cdot a_m Z^{p-1} \left(\frac{1^{m-p} - (-1)^{m-p}}{m-p} \right) \right] \quad (94)$$

O algoritmo MEA foi desenvolvido em linguagem Python. A validação do modelo numérico foi realizada por meio da comparação com a solução exata dos elementos analíticos apresentada em Strack (2003), considerando as mesmas situações extensamente discutidas em Marin (2011), Boico (2017) e Hussain (2017), sendo obtidas concordâncias similares entre as soluções, indicando resultados corretos da simulação com inomogeneidades poligonais formadas por *line-doublets*.

Os resultados do modelo foram comparados com os dados obtidos nos experimentos de bancada desenvolvidos por Lucas (2016), em termos de perda de carga entre os pontos de entrada e saída da fratura, e curvas de passagem. Para o comparativo das curvas de passagem foi utilizado o *Continuous-Time Random Walk Particle Tracking* – CTRW, devolvido por Hansen e Berkowitz (2020a) – ANEXO III. Soluções de escoamento do MEA já foram usadas na literatura como parâmetros de entrada para simulações de transporte de solutos por métodos de *particle tracking* (BANDILLA, RABIDEAU e JANKOVIC, 2009; HERRERA, MASSABÓ e BECKIE, 2009). A escolha do CTRW baseou-se na aplicabilidade do algoritmo (PAINTER *et al.*, 2008; HANSEN e BERKOWITZ, 2014; CVETKOVIC, FIORI e DAGAN, 2016; HANSEN, 2020) e na disponibilidade de um código aberto.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados primeiramente os resultados obtidos pelas simulações com algoritmo GMP *Direct Sampling*, seguido pelos resultados do modelo MEA.

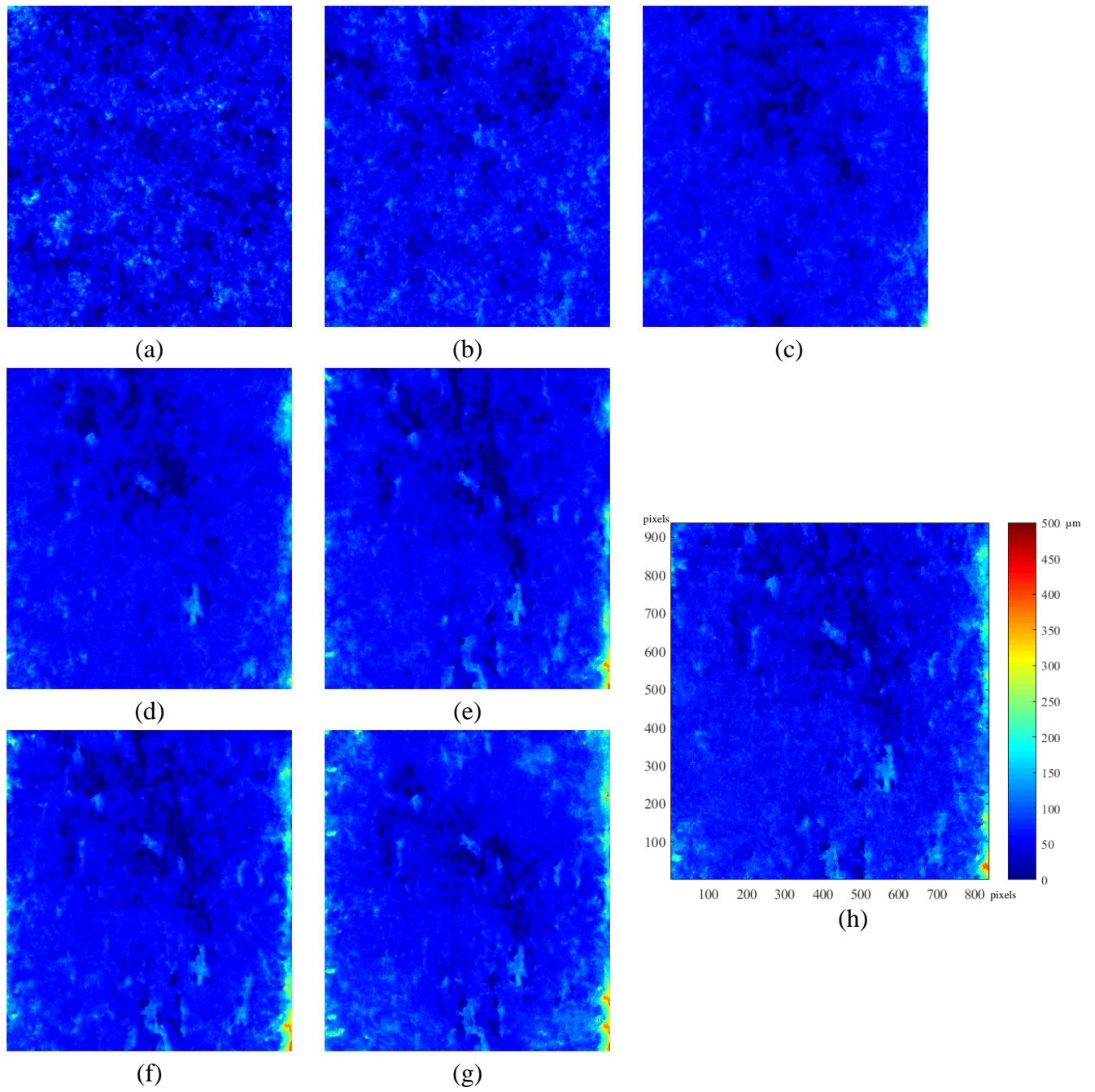
5.1. DIRECT SAMPLING

Inicialmente foi realizada uma análise de sensibilidade dos parâmetros número de vizinhos próximos n , critério de diferença máxima t e máxima fração da IT f , usando a imagem micro-CT de uma fratura como IT. Esta análise tem como objetivo utilizar de forma eficiente o potencial do DS. Foram geradas 10 simulações para cada combinação de n (5;10;20;30;40;50 e 80), t (0,1; 0,25; 0,5 e 0,75) e f (0,1; 0,25; 0,5 e 0,75). Avaliações visuais e indicadores estatísticos foram utilizados para examinar a qualidade das realizações obtidas.

5.1.1. Número de vizinhos próximos n

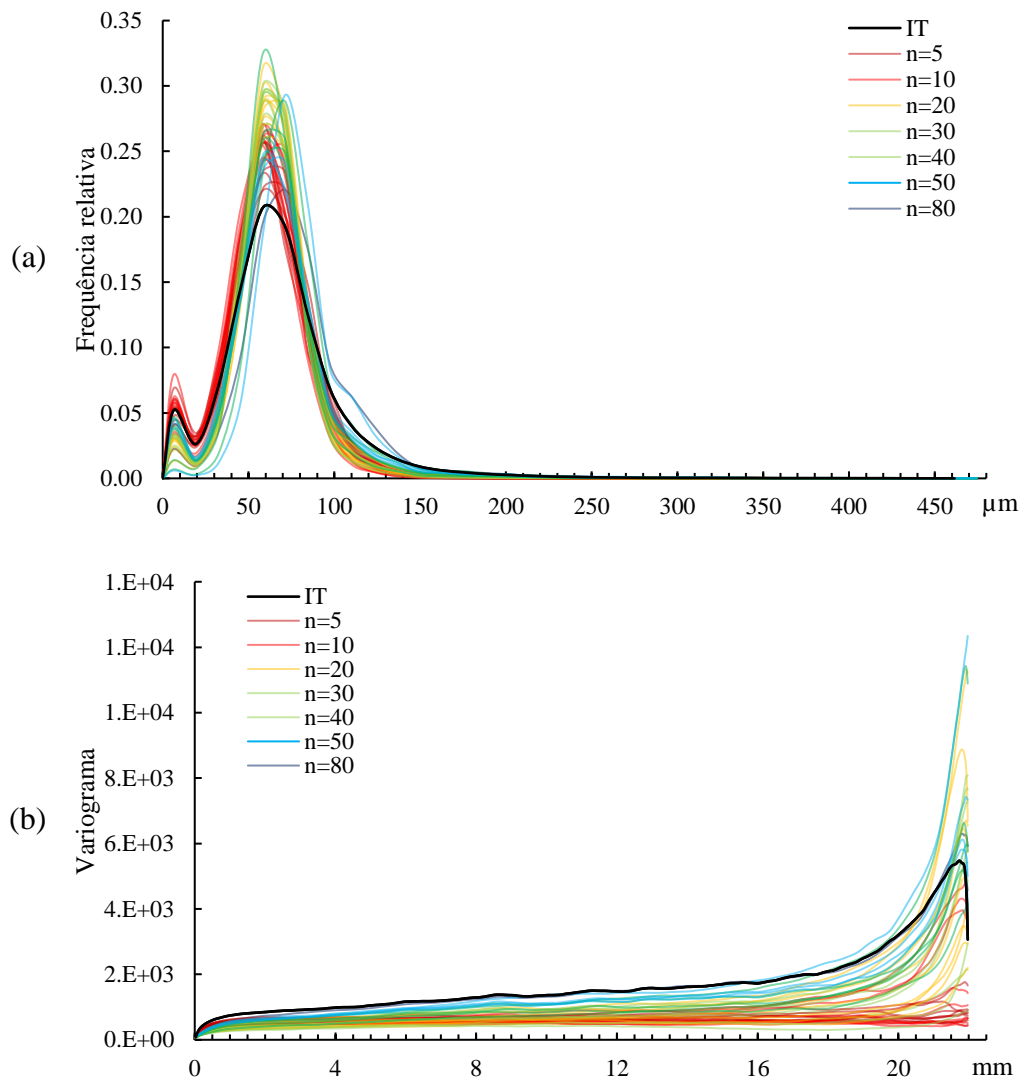
Na Figura 25 são ilustradas uma realização das 10 simulações obtidas para o número de vizinhos próximos n escolhidos, atribuindo valores constantes para t (0,1) e f (0,1), segundo indicado na literatura (MARIETHOZ, 2009). Foram selecionadas simulações com diferentes níveis de qualidade para ilustrar a evolução nos resultados. A Figura 25h representa a IT com os valores de abertura segundo a escala de cores (0 a 500 μ m). A Figura 26 mostra os histogramas, variogramas e funções de conectividade da IT e das 10 simulações para cada valor de n utilizado, assim como o tempo médio de processamento das reproduções, considerando máquina de uso pessoal – processador Intel Core i7-9750H CPU 2.60GHz e RAM 16GB. Para a estimativa da função conectividade em cada imagem reproduzida, tanto para o parâmetro n , quanto t e f , foi adotada, como valor a ser avaliado, a moda das aberturas $\pm 10\mu$ m, conforme Anexo I.

Figura 25. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $n = 5$, (b) $n = 10$, (c) $n = 20$, (d) $n = 30$, (e) $n = 40$, (f) $n = 50$, (g) $n = 80$ e (h) IT.



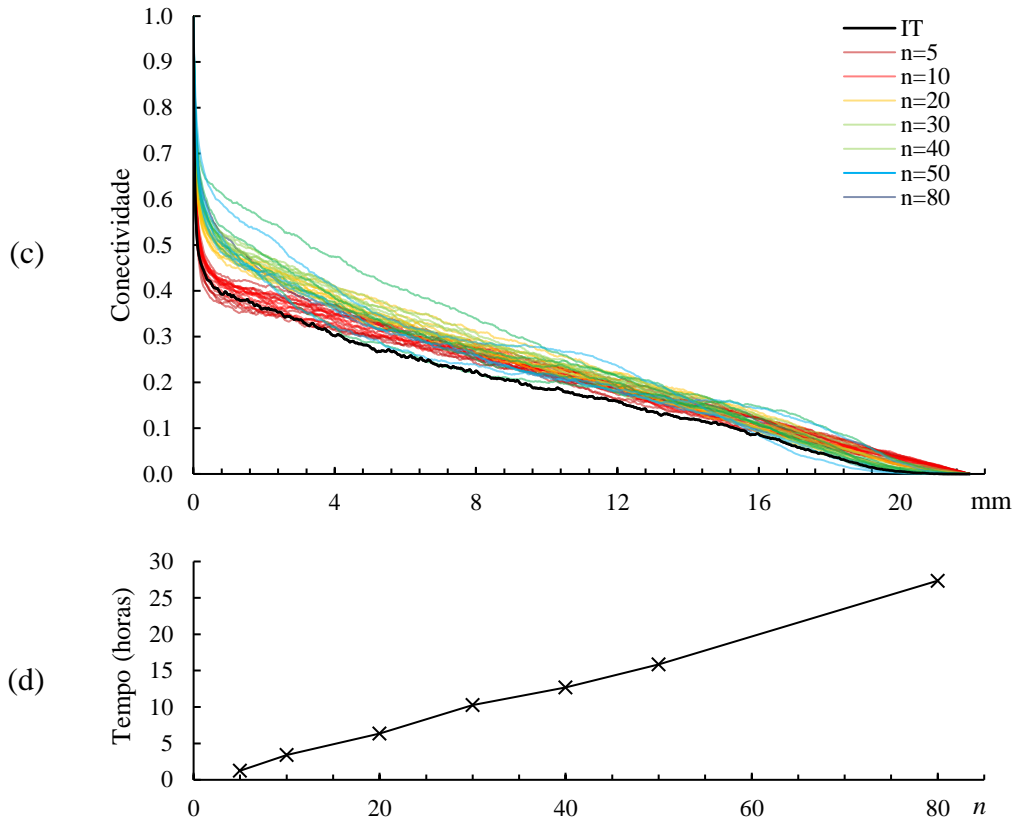
Fonte: Autor (2023).

Figura 26. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro n : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo médio de processamento requerido.



Fonte: Autor (2023).

Figura 26. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro n : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo médio de processamento requerido (**continuação**).



Fonte: Autor (2023).

A execução do DS com $n = 5$ ou $n = 10$ resulta em uma reprodução ruim dos padrões espaciais e, aparentemente, com ruído nas imagens (Figuras 25a e 25b). É possível observar que os padrões não foram reproduzidos adequadamente, pois visualmente a distribuição apresenta uma uniformidade maior que a encontrada na IT, sem regiões isoladas caracterizadas por agrupamentos de pixels com valores de abertura $\leq 25\mu\text{m}$ (azul escuro) e $\geq 200\mu\text{m}$ (regiões amarelas), facilmente identificadas na IT. A qualidade da simulação é boa para $n = 20$, considerando o objetivo da utilização do DS, reproduzir simulações similares dos padrões de abertura, sem resultar em cópias da IT. Os resultados indicam uma boa concordância entre a realização e a imagem micro-CT, preservando a conectividade da amostra, bem como a variabilidade na distribuição espacial das aberturas.

Para $n \geq 30$, as simulações se aproximam de cópias da IT, onde conforme o valor de n aumenta, é possível identificar regiões exatamente iguais. Esse fenômeno é chamado de 'patching' (MEERSCHMAN *et al.*, 2013). Este pode estar relacionado a combinação de valores elevados de n (≥ 30 neste caso) e um critério de similaridade restritivo ($t = 0,1$). Assim, para

que a diferença máxima seja satisfeita (Equação 69) com uma quantidade grande de pontos “amostrados”, o número de possibilidades de configuração espacial na janela de busca se torna menor, aumentando as chances de a cada ponto simulado, o algoritmo realizar a cópia dos mesmos padrões na IT.

A Figura 26 permite comparar o histograma, variograma e função de conectividade da IT com as 10 simulações para cada valor de n proposto. Ambos os valores do variograma padrão e da função de conectividade foram calculados para distâncias de 1 unidade na direção X (direção do fluxo), resultando em 838 intervalos (*lags*).

A Figura 26a mostra as distribuições de abertura das realizações e IT. Pode-se observar que existe uma boa concordância entre as realizações geradas e a micro-CT. Porém, em geral, $n \leq 10$ e $n \geq 50$ apresentam uma melhor reprodução nas proporções dos valores de abertura. Entretanto, como o principal objetivo da utilização do DS foi reproduzir padrões semelhantes e evitar cópias da IT, estes valores de n não resultam visualmente em uma simulação esperada. Para $n = 20$, a distribuição do histograma demonstra desvios da IT, mas mantém os valores de moda das aberturas em torno de 60 μm . Este valor de n é considerado a melhor configuração do parâmetro visualmente, apesar dos histogramas das simulações estarem entre aqueles com maiores discrepâncias da IT. Este resultado contra-intuitivo é discutido em Meerschman *et al.* (2013) e pode estar relacionado com a tentativa do algoritmo de respeitar a função de densidade de probabilidade (FDP) de uma determinada região da IT analisada que difere da FDP geral da IT. Isto ocorre para restrições espaciais fortes na janela de busca ($t = 0,1$ por exemplo), e número significativo de vizinhos próximos (≥ 30 neste caso), somados à não estacionariedade espacial da IT.

Os variogramas padrão apresentados na Figura 26b mostram que o variograma da IT e da maioria das simulações são visivelmente diferentes. Porém, apesar das diferenças observadas, as realizações com $n \geq 20$ revelam uma tendência do DS de reproduzir a estatística de dois pontos dos dados da IT com sucesso. Uma mudança na inclinação dos variogramas é observada para distâncias entre 0,5 e 1,0 mm em todos os gráficos, o que indica um comprimento de correlação de alguns milímetros (NUSSBAUMER *et al.*, 2020). No entanto, para distâncias mais longas, os variogramas aumentam gradativamente as inclinações sem atingir um patamar (*sill*). Para $n = 20$, os variogramas das reproduções apresentam um comportamento similar ao da IT, apesar dos “afastamentos/desvios” notados.

Os gráficos das funções conectividade (FC) da imagem micro-CT e dos resultados das simulações são apresentados na Fig. 26c. Pode se notar uma anisotropia para os maiores valores das FCs na direção X até uma distância em torno de 0,8 mm (PARDO-IGÚZQUIZA e DOWD,

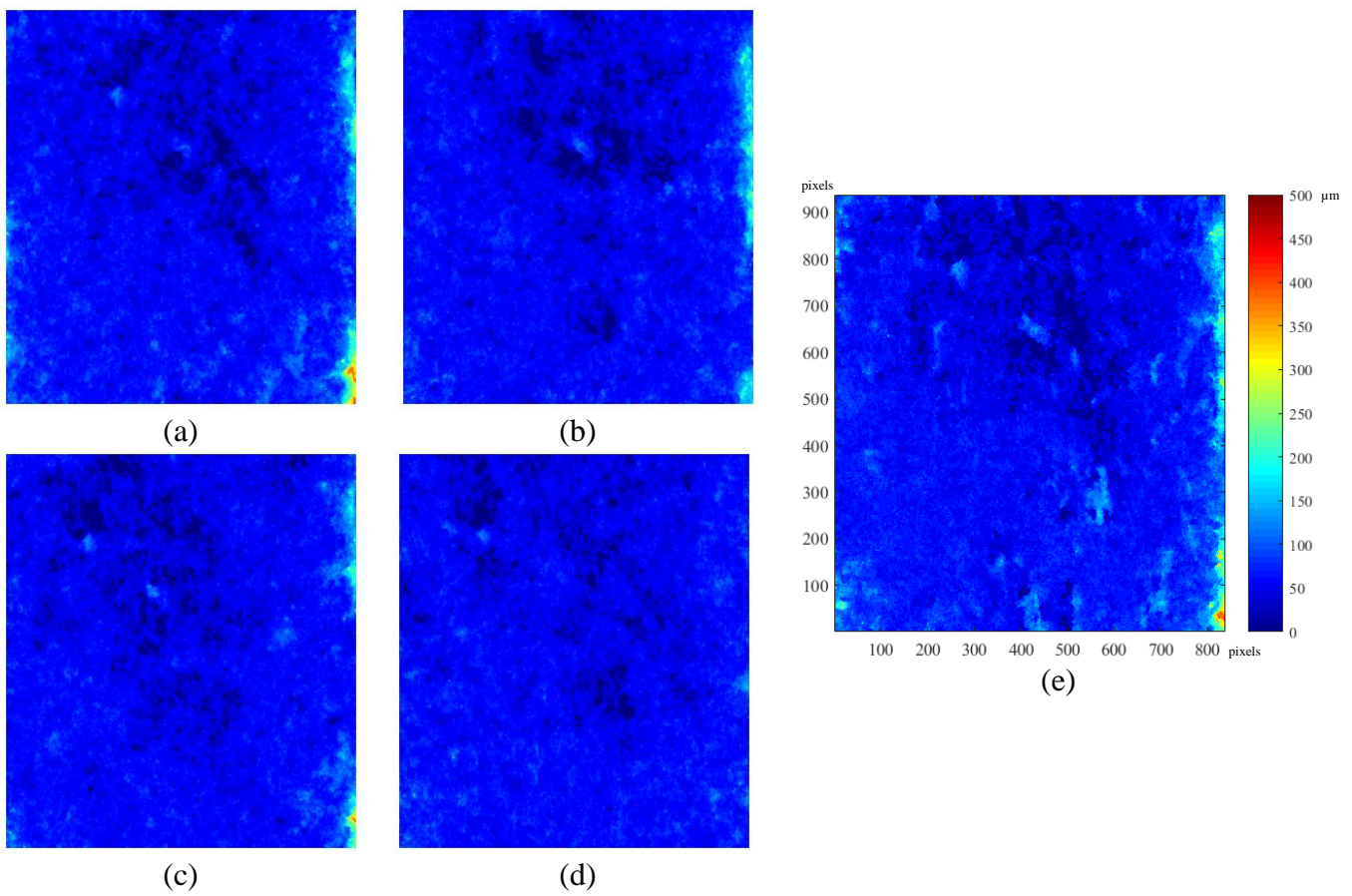
2003), onde os gráficos mudam de inclinação mantendo um declive constante para as distâncias maiores. Valores de aberturas maiores nas laterais (esquerda e direita) da IT resultantes da extração da amostra podem ser a causa desta alteração nos gráficos. As FCs das realizações do DS se aproximam da distribuição da IT para $n \leq 10$ e $n \geq 40$. Valores de n entre este intervalo possuem FCs com o maior afastamento (valores maiores de FC), e tendem a zero de forma gradativa e suavizada em comparação a IT. Para $n = 20$, as FCs indicam que as aberturas nas simulações apresentam uma conectividade maior que a IT, fator que influencia um modelo de fluxo. No entanto, as FCs que estão mais próximas da IT correspondem a imagens onde o padrão difere significativamente do desejado (ruído), ou são uma cópia dos dados originais.

Em termos de tempo de processamento, o gráfico da Figura 26d mostra valores condizentes com o número de vizinhos avaliados em cada configuração, no qual quanto maior a quantidade de pontos a serem comparados, maior o tempo necessário (MEERSCHMAN *et al.*, 2013).

5.1.2. Diferença máxima t

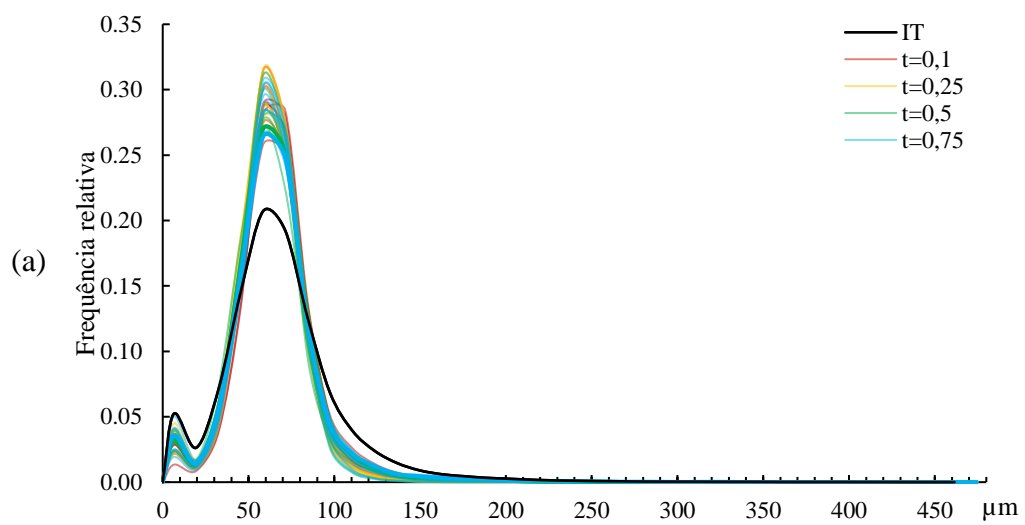
A Figura 27 mostra uma simulação selecionada de um conjunto de 10 para $t = 0,1; 0,25; 0,5$ e $0,75$, atribuindo valores constantes para n (20) e f (0,1). A Figura 28 mostra os histogramas, variogramas e funções de conectividade da IT e as 10 realizações para cada valor de t , e os respectivos tempos médios de processamento.

Figura 27. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $t = 0,10$; (b) $t = 0,25$; (c) $t = 0,5$; (d) $t = 0,75$ e (e) IT.



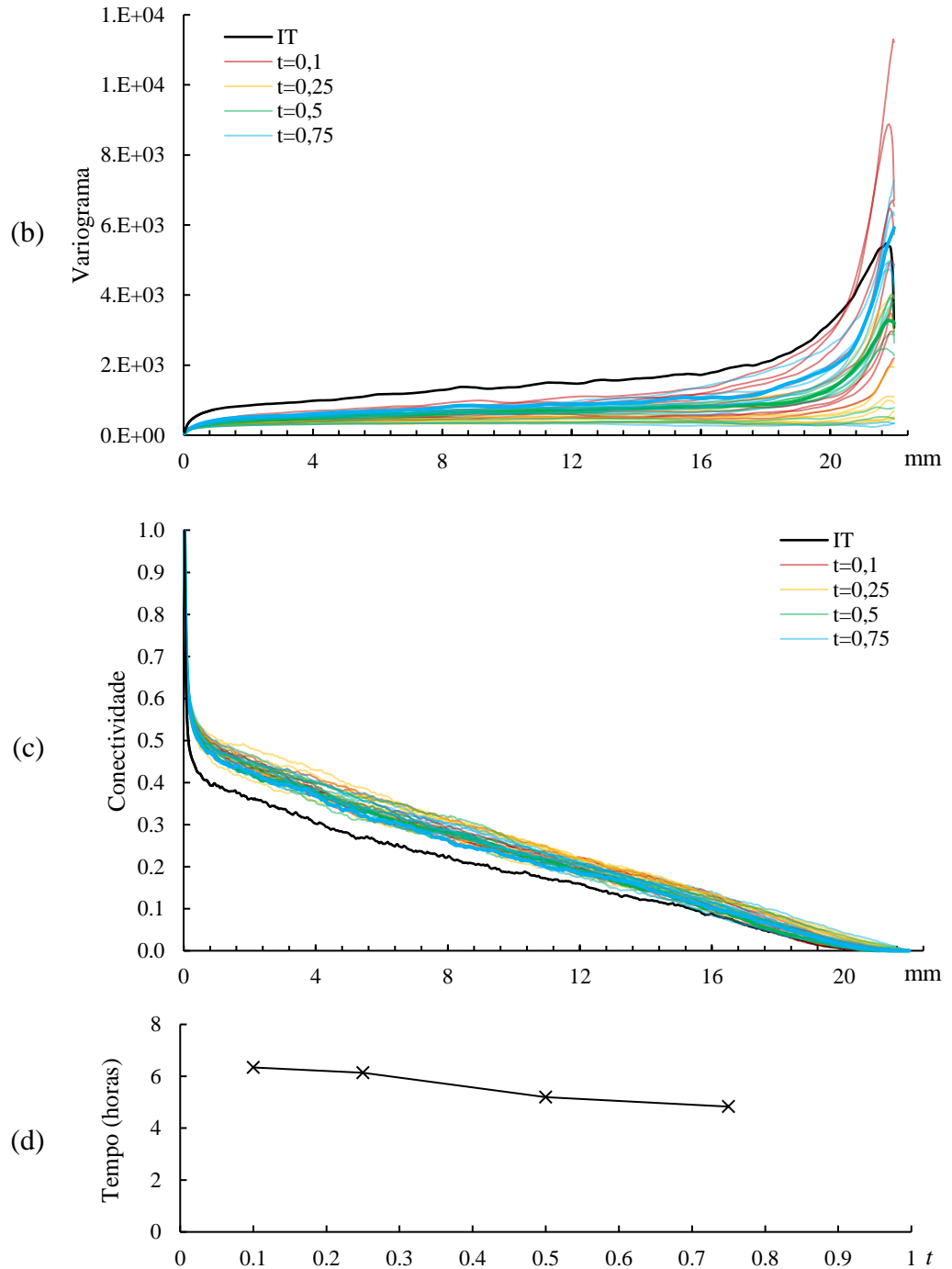
Fonte: Autor (2023).

Figura 28. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro t : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo de processamento requerido



Fonte: Autor (2023).

Figura 28. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro t : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo médio de processamento requerido (**continuação**).



Fonte: Autor (2023).

Na comparação visual com a IT pode-se observar que as realizações com valores $t \leq 0,5$ reproduzem melhor o padrão da imagem original. Também é possível concluir pelas Figuras 27a a 27c que o parâmetro t (para valores 0,1 a 0,5) não tem grande influência na qualidade da simulação, considerando o objetivo específico da GMP neste trabalho. Para $t = 0,75$, as

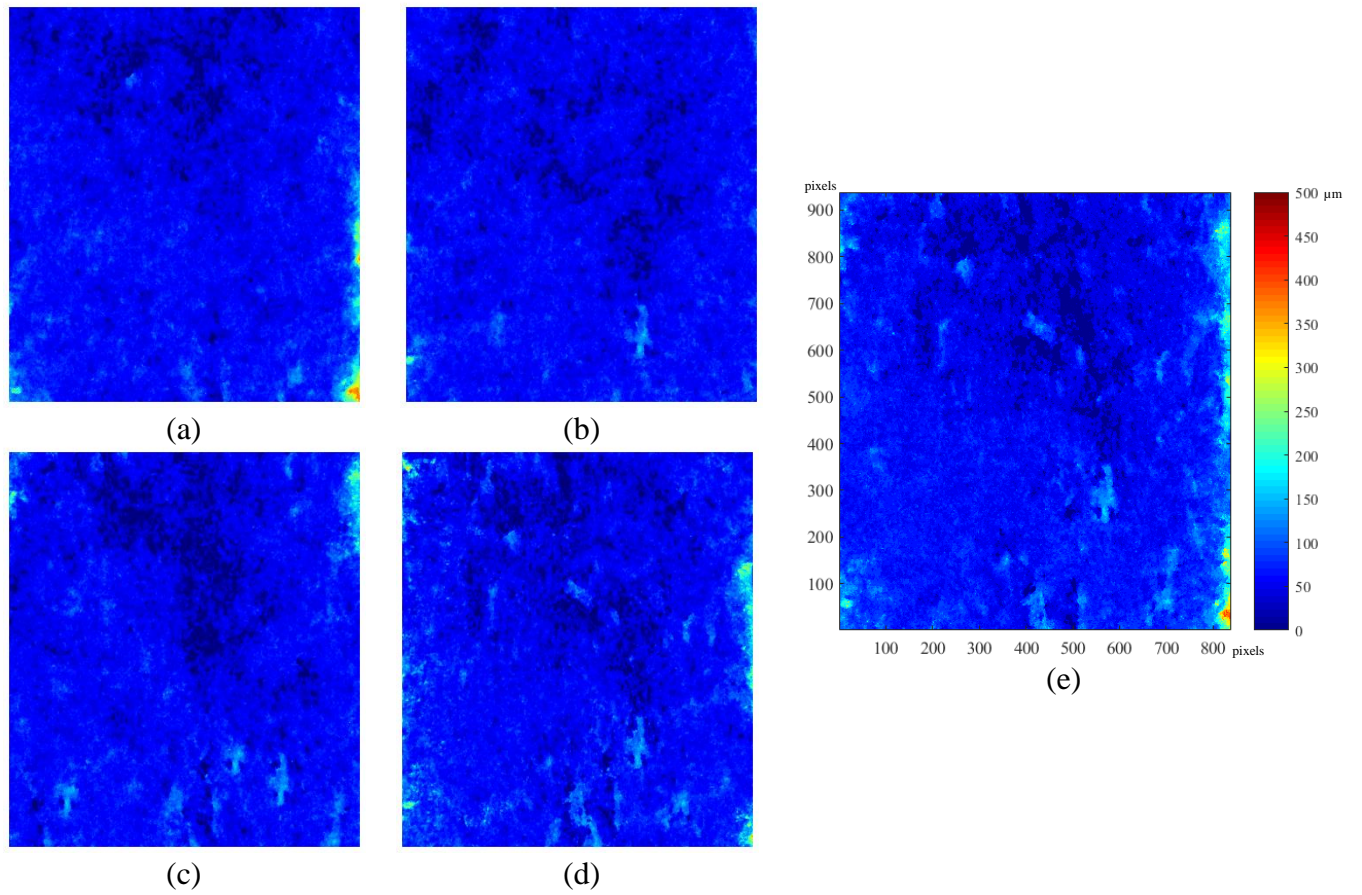
estruturas amarelas presentes na IT (valores de abertura em torno de $300\ \mu\text{m}$ – Figura 27h) são escassas, podendo considerar uma simulação ruim. Neste caso ($t = 0,75$), a amostragem não é seletiva o suficiente: quanto maior o valor de t , maiores as chances de qualquer padrão da IT ser aceito (Equação 69) (MARIETHOZ, RENARD e STRAUBHAAR, 2010). Estes valores de t correspondem às situações em que o algoritmo é mais rápido (Figura 28d) (MEERSCHMAN *et al.*, 2013). No entanto, as realizações para $t = 0,75$ ainda mantêm estruturas similares (valores de abertura em torno de $20\ \mu\text{m}$) semelhantes à imagem original.

Os histogramas são, de uma maneira geral, semelhantes para todas as simulações. Pode-se observar também uma boa concordância entre as realizações geradas e os dados da micro-CT, com valores maiores de frequência para a moda (observado também na avaliação visual). Para $t = 0,75$, os histogramas estão mais próximos da IT, apesar das diferenças nas imagens. Segundo Meerschman *et al.* (2012), para simulações com valores de t elevados (próximos de 1,0), o DS amostra aleatoriamente valores da IT, resultando em uma boa reprodução das distribuições marginais (histogramas próximos aos dados da IT), mas uma pior reprodução da continuidade espacial, observada nos variogramas pelo afastamento dos gráficos das reproduções da IT (Figura 28b). As FCs (Figura 28b) mostram, assim como nos histogramas, gráficos semelhantes para todas as simulações, evidenciando que a conectividade é pouco influenciada pelo parâmetro t . Para $t = 0,75$ são obtidas as FCs mais próximas ao gráfico da IT.

5.1.3. Fração máxima f da IT

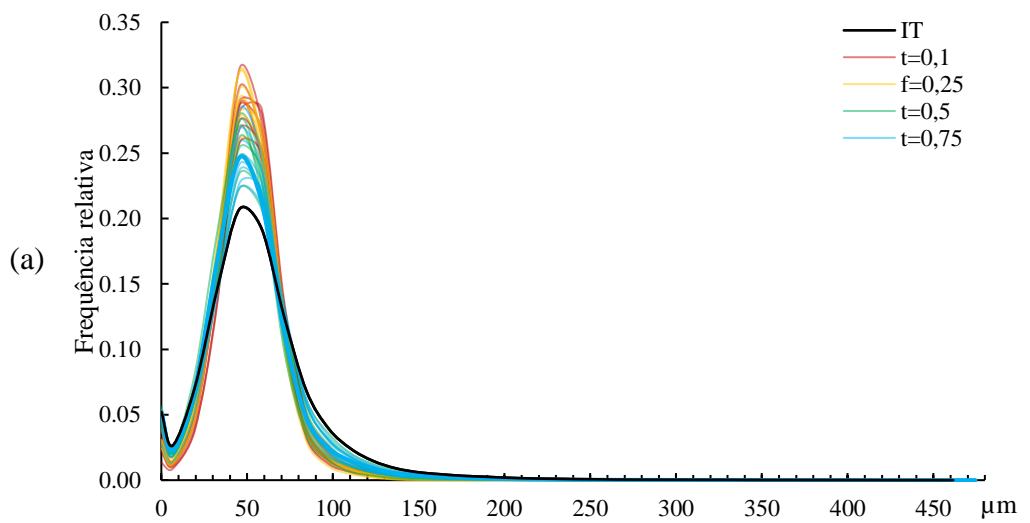
A Figura 29 mostra uma realização de 10 simulações para cada f avaliado (0,1; 0,25; 0,5 e 0,75), atribuindo valores constantes para n (20) e t (0,1). São também analisados os histogramas, variogramas e funções de conectividade da IT e todas as realizações (Figura 30), além dos tempos médios de processamento requeridos.

Figura 29. Imagens obtidas a partir da aplicação do DS na IT para: (a) $f = 0,10$; (b) $f = 0,25$; (c) $f = 0,5$; (d) $f = 0,75$ e (e) IT.



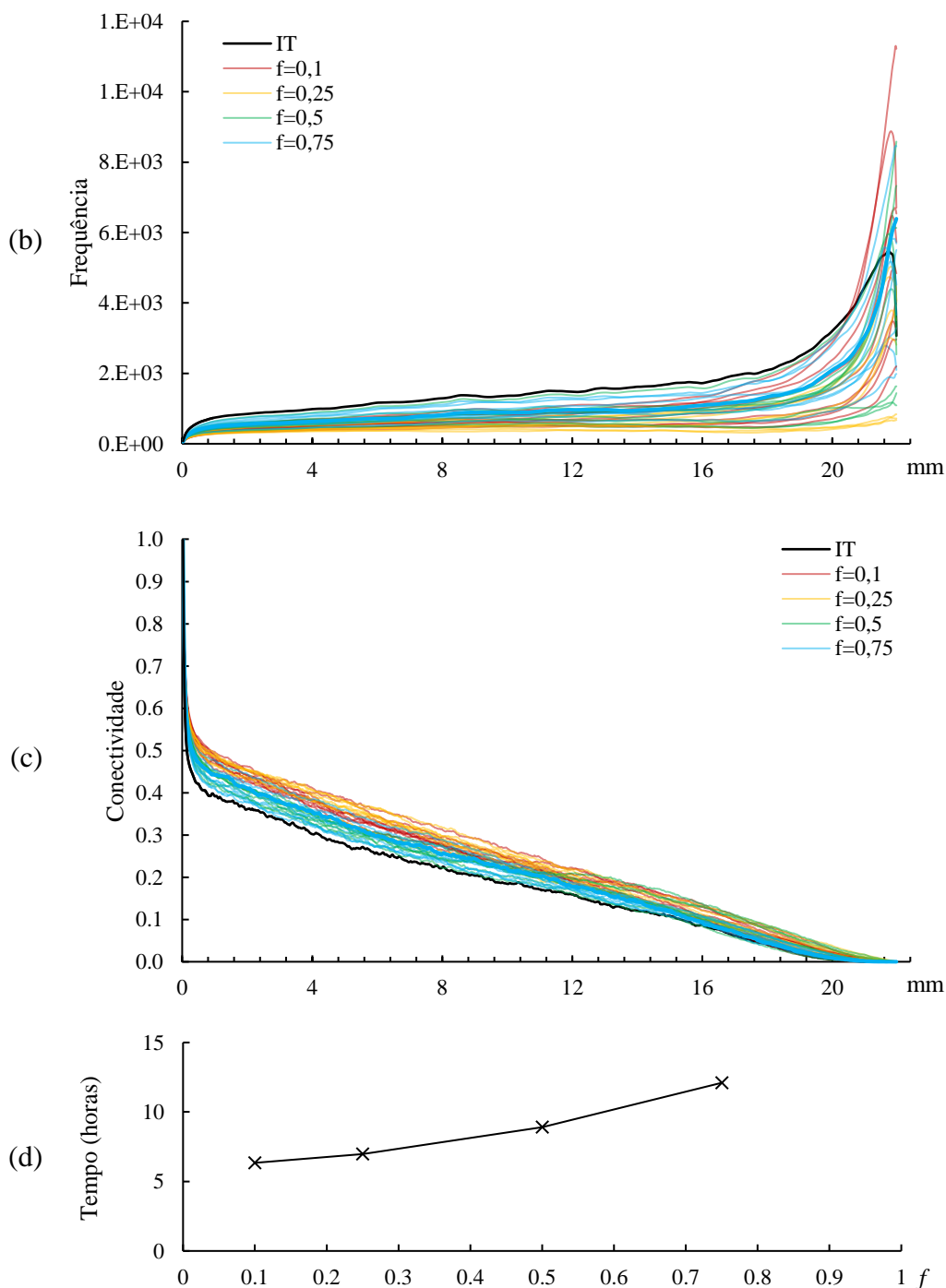
Fonte: Autor (2023).

Figura 30. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro f : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo de processamento requerido.



Fonte: Autor (2023).

Figura 30. Métricas estatísticas das imagens obtidas pelo DS variando o parâmetro f : (a) histogramas, (b) variogramas, (c) funções conectividade e (d) tempo médio de processamento requerido (**continuação**).



Fonte: Autor (2023).

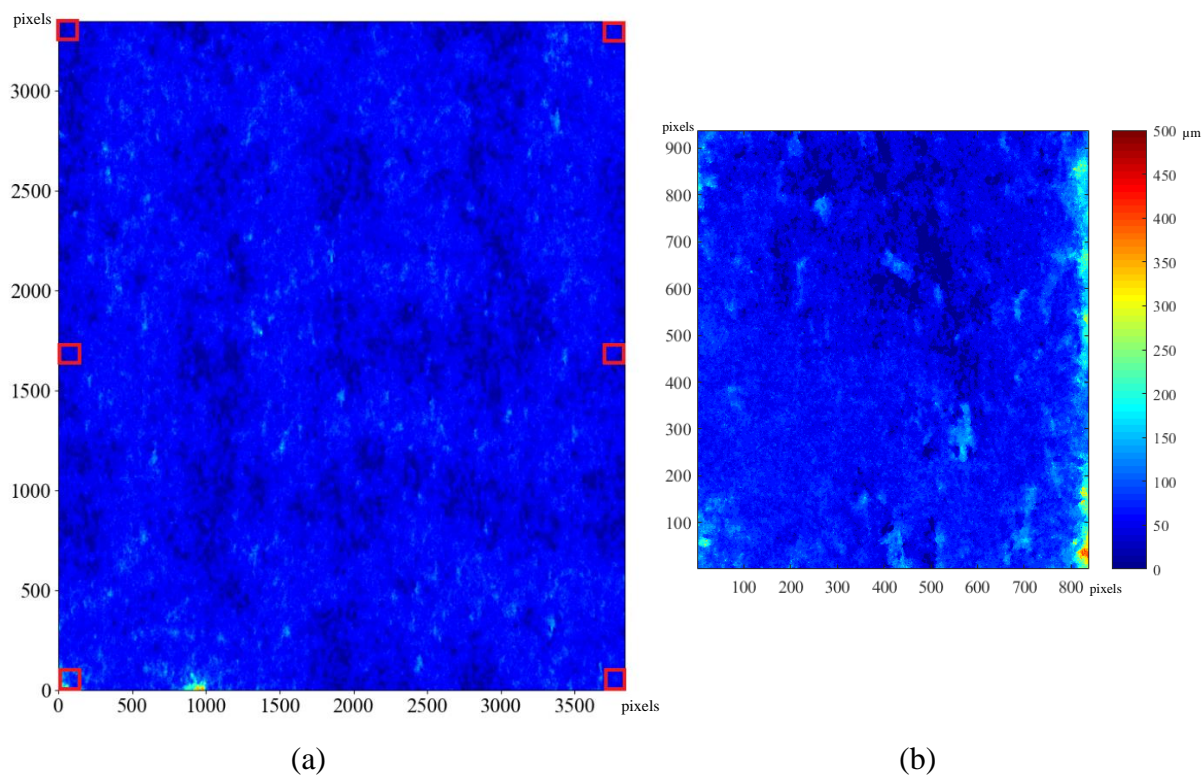
A comparação visual entre as realizações mostra que a melhor reprodução é para $f=0,1$, onde a simulação mantém os padrões de distribuição dos dados originais. Em contraste, para $f \geq 0,25$, as simulações realizam cópias exatas de partes da IT (ou praticamente a própria IT). Como discutido anteriormente, esse fenômeno é chamado de '*patching*' (MEERSCHMAN *et*

al., 2013). Estas imagens levam à conclusão de que $f = 0,1$ é a melhor opção. Escanear uma parte menor da IT dificilmente resulta em queda de qualidade nas simulações, conforme discutido por Mariethoz (2010).

Os indicadores estatísticos da Figura 30 mostram um comportamento intuitivo com base nas inspeções visuais, onde para os maiores valores de f os histogramas, variogramas e funções de conectividade têm boa concordância entre as realizações e a imagem micro-CT. Enquanto para $f = 0,1$ a simulação reproduz visualmente bem o resultado esperado, os variogramas entretanto, demonstram flutuações e possuem desvios do variograma da IT. Apesar dessa diferença, os variogramas para $f = 0,1$ revelam que o DS foi capaz de reproduzir com sucesso a correção espacial dos dados da micro-CT. Comportamento semelhante é obtido nos FCs. Com relação ao tempo de processamento, maiores frações da IT para “escanear” resulta, conseqüentemente, em um maior esforço computacional, concordando com os resultados de Meerschman *et al.* (2013).

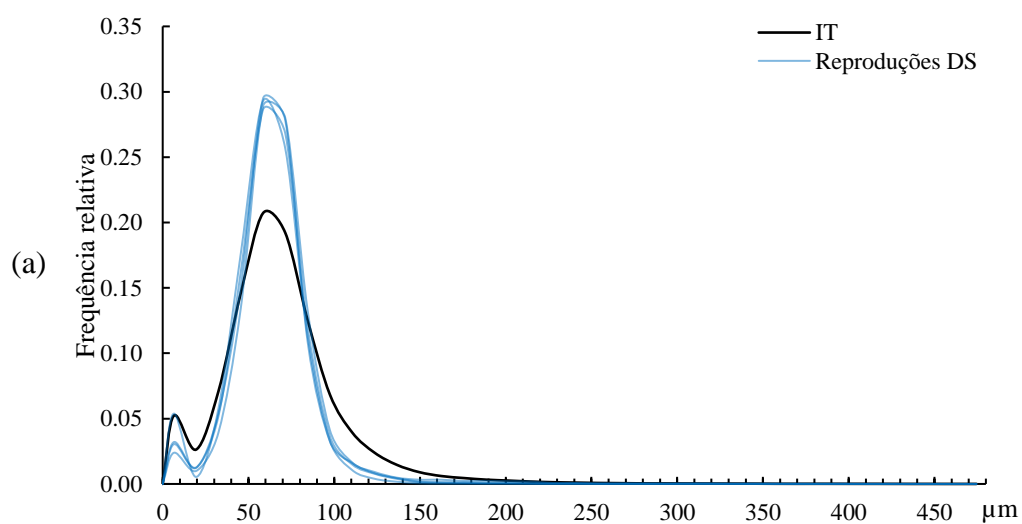
A configuração de parâmetros considerada a ideal foi assumida como: $n = 20$, $t = 0,25$ e $f = 0,1$, tendo em vista os resultados visuais, próximos ao desejado, somado a avaliações estatísticas condizentes com a IT e um tempo de processamento aceitável. Estes valores foram utilizados no segundo objetivo específico da aplicação do DS nesta pesquisa. Utilizando dados condicionais pontuais nos vértices da malha de simulação e regiões centrais das arestas (marcações em vermelho – Figura 31), foram reproduzidos os padrões de distribuição de abertura da micro-CT em uma malha de simulação de dimensões proporcionais à amostra submetida ao experimento de bancada (LUCAS, 2016), com intuito de fornecer os valores de abertura para o modelo de simulação baseado no MEA. A localização dos dados condicionais foi realizada visando eliminar valores de abertura provenientes de quaisquer deformações na extração da amostra submetida a micro-CT (valores de abertura $\geq 300\mu\text{m}$ nas extremidades esquerda e direita – Figura 31b). A Figura 31a ilustra uma reprodução de 4 simulações realizadas, juntamente com os histogramas, variogramas e funções conectividade destas e da IT na Figura 32.

Figura 31. (a) Reprodução expandida dos padrões de distribuição da IT utilizando o DS (destacados em vermelho os dados condicionais) e (b) IT.



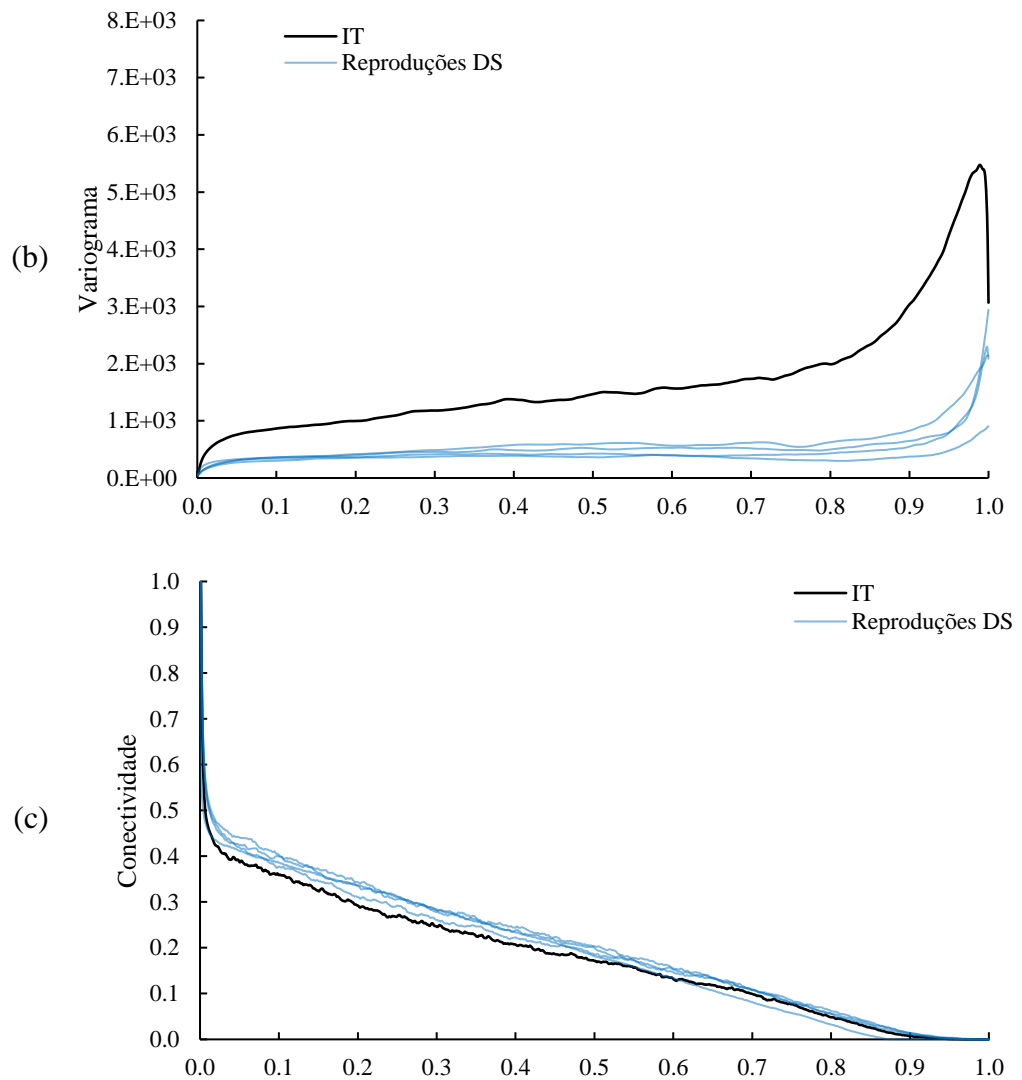
Fonte: Autor (2023).

Figura 32. Métricas estatísticas das imagens expandidas obtidas pelo DS: (a) histogramas, (b) variogramas e (c) funções conectividade.



Fonte: Autor (2023).

Figura 32. Métricas estatísticas das imagens expandidas obtidas pelo DS: (a) histogramas, (b) variogramas e (c) funções conectividade (**continuação**).



Fonte: Autor (2023).

Assim como a imagem apresentada na Figura 27b ($n = 20$; $t = 0,25$; $f = 0,1$), a Figura 31a visualmente apresenta uma boa reprodução dos padrões da IT, aparentemente evitando o fenômeno ‘*patching*’. Os histogramas, variogramas e funções conectividade mantem distribuições similares a IT, com flutuações e desvios similares ao discutido nos itens anteriores.

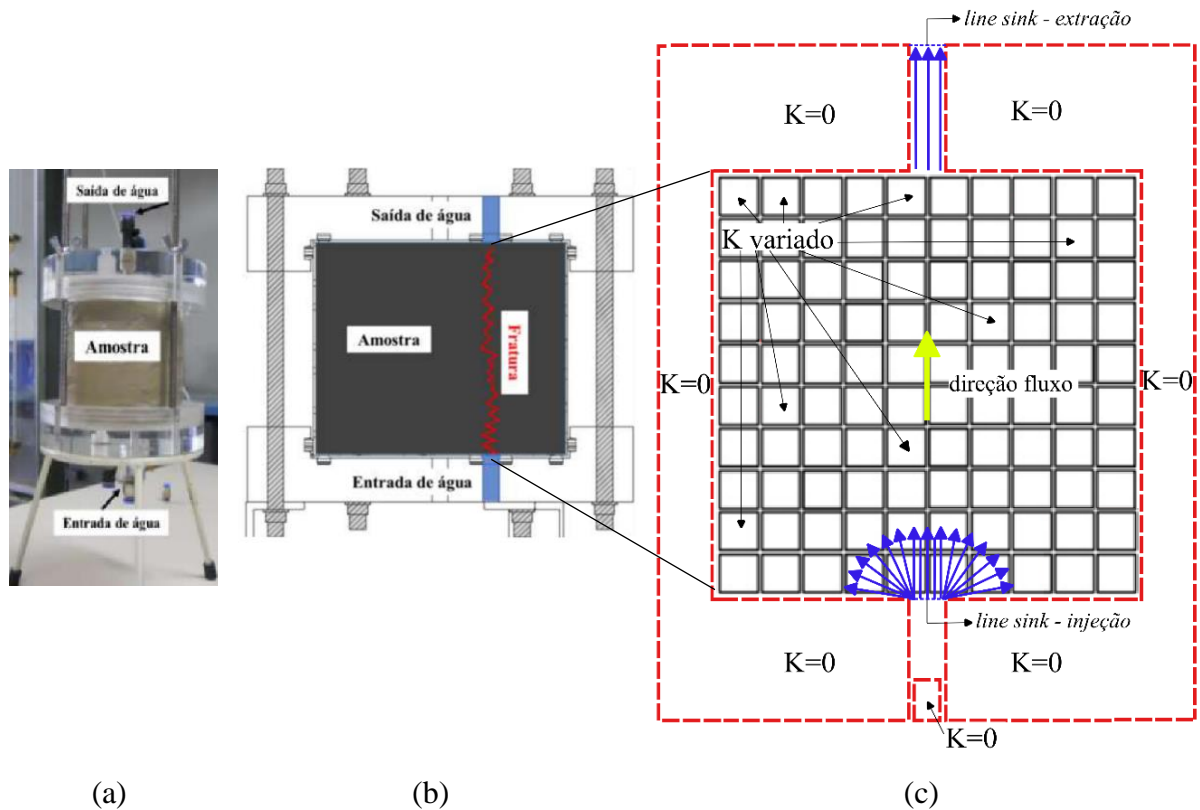
5.2. MODELO DE ESCOAMENTO MEA

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações obtidas com os elementos analíticos apresentados no item 3.3.3. O sistema simulado consiste em um modelo conceitual do escoamento em uma fratura, visando representar os experimentos de injeção de soluto em escala de bancada desenvolvidos por Lucas (2016) (Figura 33). O modelo MEA da fratura foi

desenvolvido em um domínio horizontal com coordenadas (x, y) , no qual o lado esquerdo e direito são assumidos como limites sem fluxo, assim como os lados superior e inferior, com exceção das aberturas para de injeção e extração de fluxo nestas arestas. Os limites sem fluxo são representados cada um por polígonos formados por *line-doublets* com condutividade zero ($K=0$). Os fluxos nas aberturas (injeção e extração) são representados por *line-sinks*. O plano da fratura é representado por um campo heterogêneo de condutividades hidráulicas K , calculadas a partir das aberturas apresentadas no item 5.1 e aplicação da Lei Cúbica (Anexo II), sendo o mesmo considerado confinado. Este domínio foi discretizado em 100 partes iguais, e cada parte é representada por um polígono com quatro *line-doublets*, totalizando 400 elementos analíticos. O espaçamento entre os polígonos foi adotado como 10^{-2} cm. O campo de escoamento uniforme é considerado de intensidade desprezível (10^{-13} cm².s⁻¹). A ordem da série de expansão (série de Chebyshev) adotada foi 6, considerando o critério de significância 10^{-3} , com número de pontos de controle igual a 20. Os principais parâmetros do modelo estão listados na Tabela 1.

Foram simulados o escoamento em 4 fraturas diferentes geradas pelas simulações com o algoritmo DS a partir da imagem de treinamento micro-CT (item 5.1), denominadas Fratura 1, Fratura 2, Fratura 3 e Fratura 4. Foram simuladas 4 vazões de injeção na fratura, conforme o experimento de Lucas (2016). Os principais resultados obtidos por Lucas (2016) foram resumidos em Lucas, Cantareira e Wendland (2019) e utilizados no comparativo com as simulações, sendo apresentados na Tabela 2 e nas curvas de passagem na Figura 34. Para o comparativo das curvas de passagem foi simulado o comportamento de um traçador numérico por meio do modelo CTRW (HANSEN e BERKOWITZ, 2020a).

Figura 33. Experimento desenvolvido por Lucas (2016): (a) aparato laboratorial e (b) projeto, e em (c) modelo conceitual baseado no MEA representando o experimento.



Fonte: Lucas (2016); Autor (2023).

Tabela 1 - Principais parâmetros do modelo MEA.

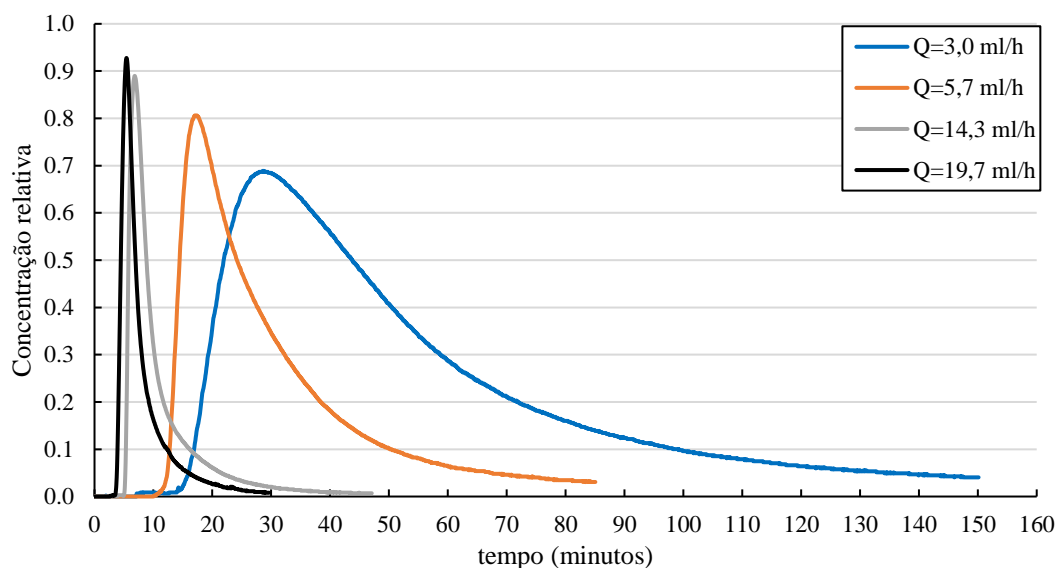
Parâmetro	
Massa específica da água ρ^*	997,6 kg.m ⁻³
Viscosidade dinâmica η^*	9,75×10 ⁻⁴ N.s.m ⁻²
Carga hidráulica de referência	120 cm
Condutividade hidráulica no meio (espaço entre os <i>line-doublets</i>)	0,25 a 0,27 cm/s
Condutividade hidráulica nos <i>line-doublets</i>	0,04 a 0,95 cm/s
Critério de parada Gauss-Seidel	10 ⁻⁶

*Estimativa da condutividade hidráulica pela Lei Cúbica

Tabela 2 - Principais resultados obtidos por Lucas, Cantareira e Wendland (2019).

Vazão de injeção (ml.h ⁻¹)	Velocidade média estimada (cm.min ⁻¹)	Perda de carga (cm)
3,0	0,51 a 7,30	27
5,7	0,84 a 14,90	51
14,3	2,4 a 34,56	125
19,7	3,36 a 47,48	173

Figura 34. Curvas de passagem do experimento de bancada para as diferentes vazões de injeção.



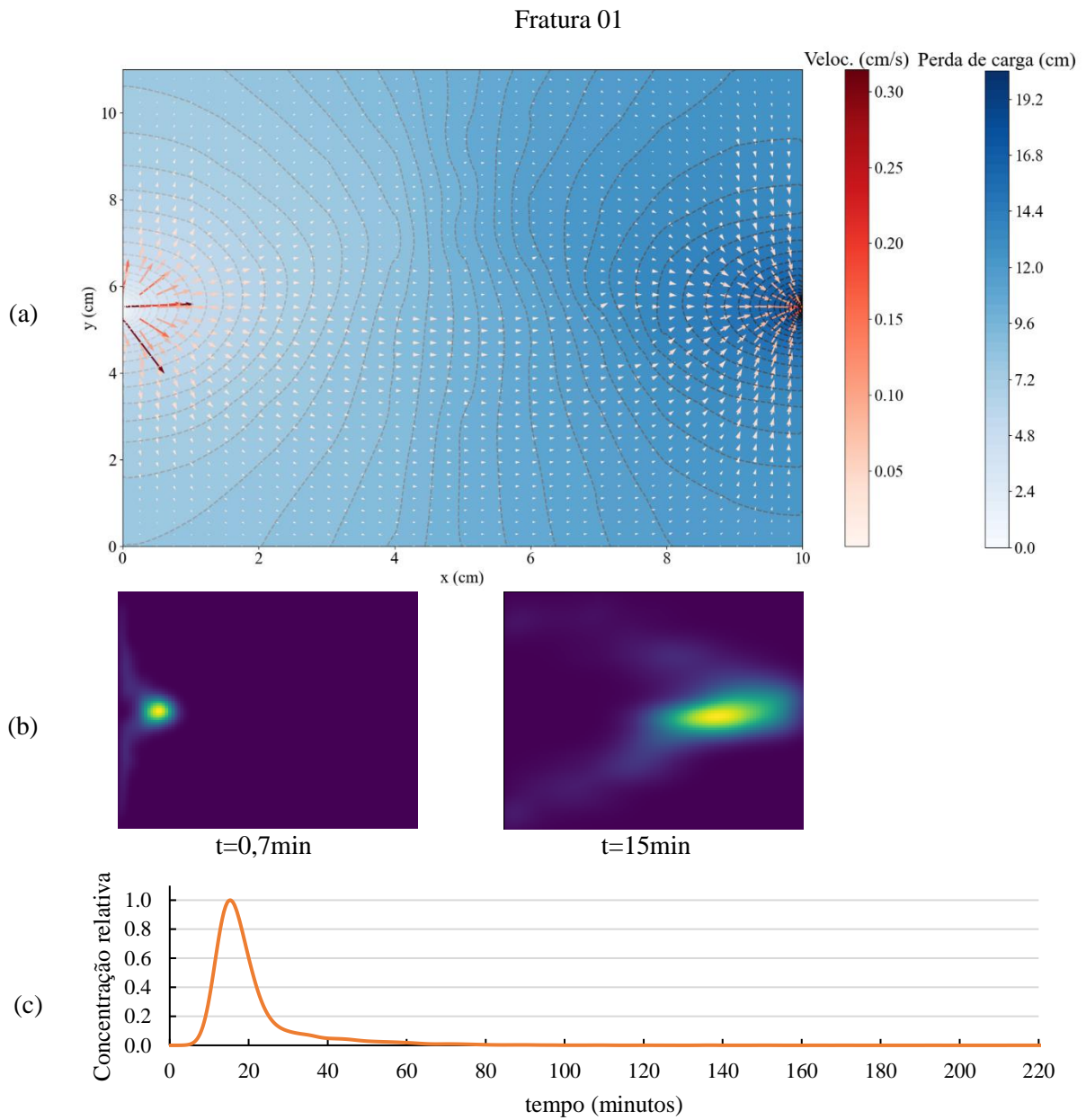
Fonte: Lucas, Cantareira e Wendland (2019).

A seguir são apresentados os resultados obtidos pelo MEA segundo a vazão de injeção simulada.

5.2.1. $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$

As Figuras 35 a 38 apresentam os resultados para a vazão de injeção de $3,0 \text{ mL.h}^{-1}$. Em (a) são apresentadas as perdas de carga ao longo do escoamento na fratura, com fluxo da esquerda para a direita, juntamente com os campos de velocidade, com tamanho das setas e coloração em função da magnitude. A opção pela representação dos campos de velocidade em detrimento das linhas de fluxo foi realizada em função da possibilidade de identificar, além dos canais preferenciais paralelos às linhas de fluxo, sua intensidade. Dois outros eventos são apresentados nas Figuras 35 a 38, resultados da simulação dos processos de transporte de soluto usando o CTRW simulando um período de 330 minutos. A massa de traçador injetada foi representada por 10.000 partículas inseridas instantaneamente na extremidade esquerda ($x = 0$), entre os limites $y = 5,25 \text{ cm}$ e $y = 5,75 \text{ cm}$. Os eventos registrados foram: em (b) a localização de todas as partículas nos instantes $t = 0,7 \text{ min}$ e $t = 15 \text{ min}$, e em (c) a curva de passagem na extremidade direita ($x = 10 \text{ cm}$), em concentrações relativas.

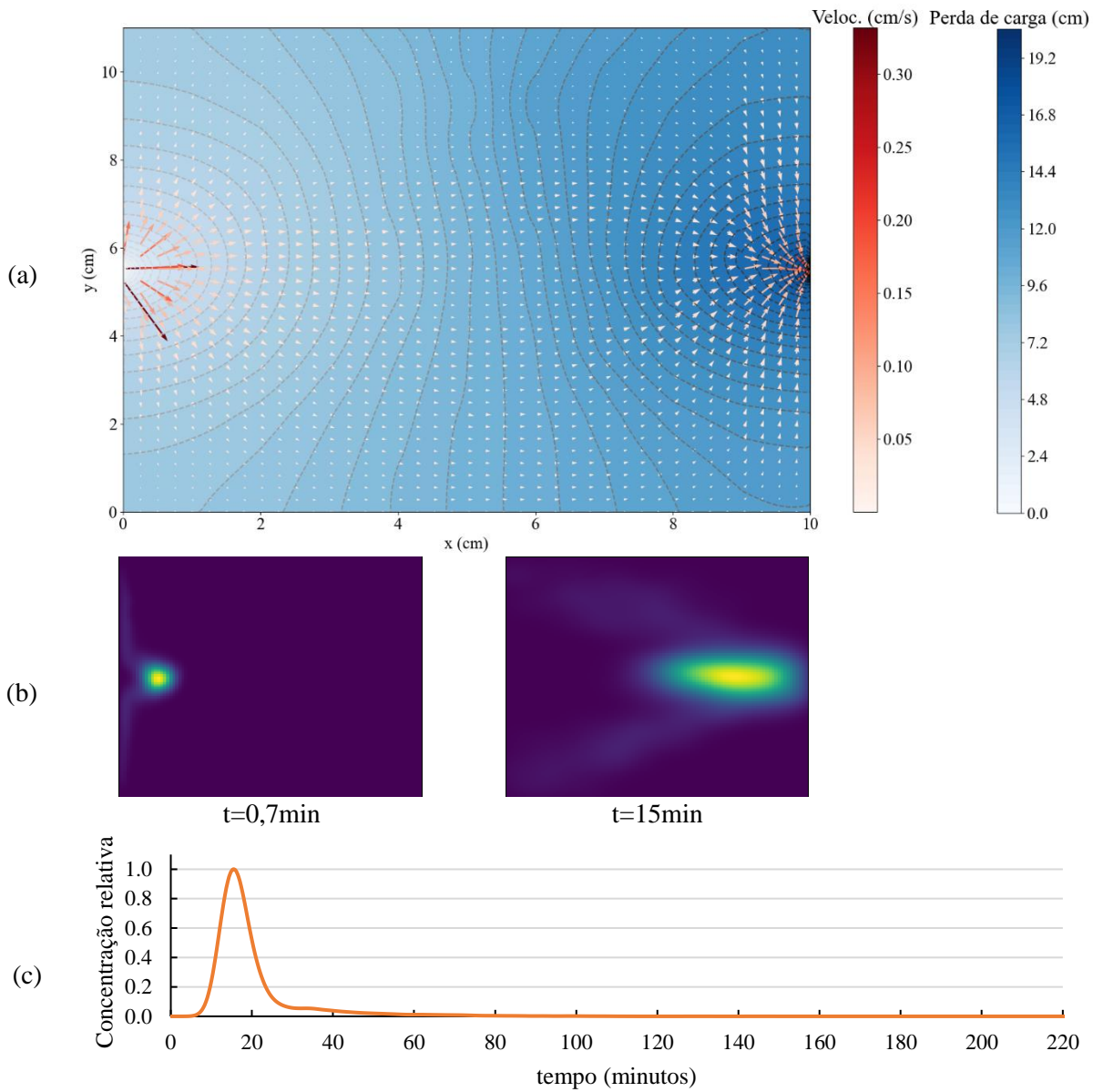
Figura 35. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

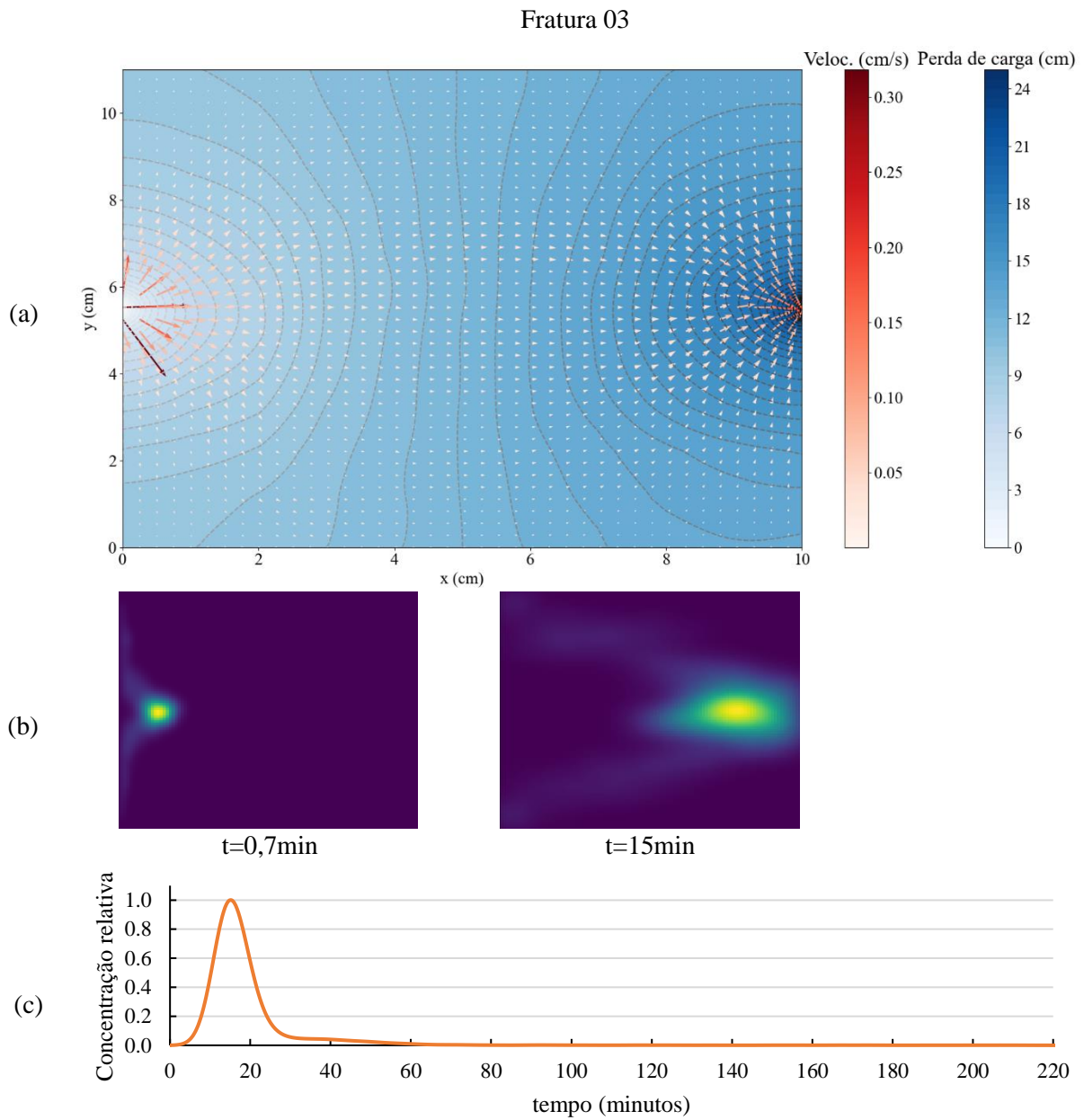
Figura 36. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.

Fratura 02



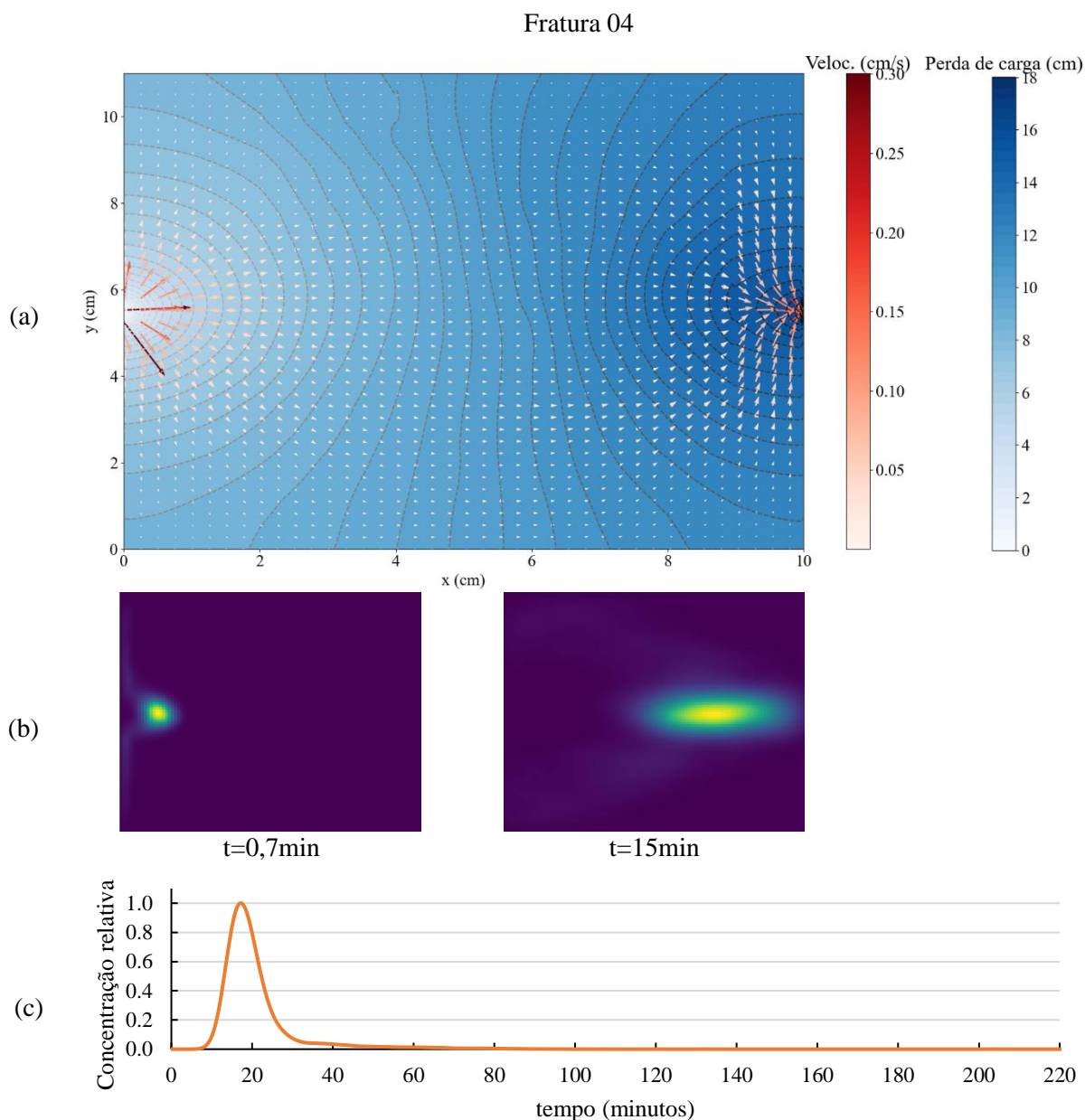
Fonte: Autor (2023).

Figura 37. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

Figura 38. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

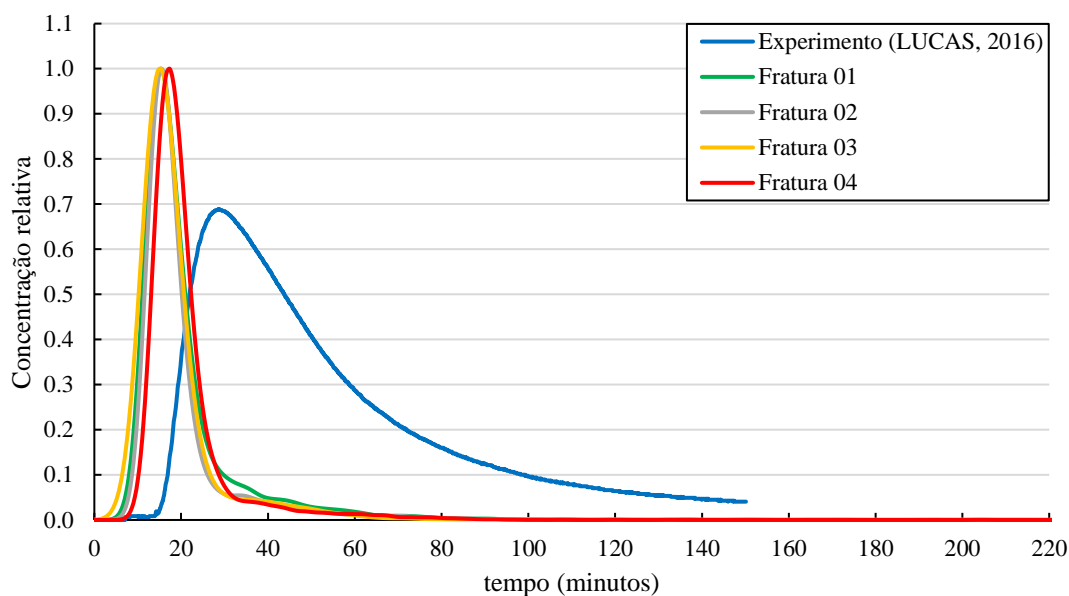
As Figuras 35a, 36a, 37a e 38a permitem identificar a distribuição das perdas de carga ao longo das fraturas pelas isolinhas tracejadas e distribuição de cores. Podem-se notar regiões onde estas apresentam maior proximidade entre si. Isto ocorre em zonas delimitadas por *line-doublers* com menor condutividade hidráulica no seu interior, onde as isolinhas tendem a “entrar” nestes elementos analíticos. Além disso, estas regiões indicam que os elementos no seu entorno possuem valores de abertura maiores, onde o fluxo tende a ser preferencial. Os campos de velocidade complementam esta visualização. Regiões com maiores valores de condutividade hidráulica podem ser identificadas pelos caminhos onde os vetores de velocidade apresentam

maior magnitude. Assim, é possível identificar que nas simulações apresentadas, o fluxo preferencial ocorre na região central das fraturas. Na Figura 35a – Fratura 01, é possível observar uma ligeira tendência do fluxo preferencial para o lado direito. Quanto ao comparativo destes resultados com aqueles obtidos por Lucas, Cantareira e Wendland (2019), pode se constatar uma boa concordância entre os valores simulados e os apresentados na Tabela 2 para a vazão de $3,0 \text{ mL.h}^{-1}$. A perda de carga observada entre a entrada e saída de fluxo na fratura no experimento foi de 27 cm, onde os valores simulados variaram entre 18 e 24 cm, aproximadamente. As velocidades médias obtidas pelo MEA são de $1,50 \text{ cm.min}^{-1}$, apresentando valores dentro do intervalo estimado por Lucas, Cantareira e Wendland (2019), com valores mínimos e máximos de $0,51 \text{ cm.min}^{-1}$ e $7,30 \text{ cm.min}^{-1}$, respectivamente. Entretanto, as conclusões de Lucas, Cantareira e Wendland (2019) indicam que valores próximos a $0,51 \text{ cm.min}^{-1}$ representam com maior precisão o transporte de solutos no experimento em questão.

A distribuição das partículas apresentadas em (b) nas Figuras 35 a 38, permite visualizar como o fluxo do traçador possivelmente ocorre em cada um dos instantes registrados. Pode-se observar que as partículas seguem de forma similar os caminhos preferenciais obtidos nos campos de velocidade, com maior densidade de partículas na região central das fraturas. Efeitos de dispersão na pluma também podem ser notados, com distribuições de menor intensidade nas laterais. Para os instantes iniciais (Figuras 35b, 36b, 37b e 38b em $t = 0,7 \text{ min}$), pode-se observar que o efeito da injeção determina que parte significativa das partículas siga preferencialmente pelo centro da fratura, com uma quantidade menor pelas laterais.

Quanto às curvas de passagem, o tempo de residência médio das partículas foi estimado em 220 minutos, em função da longa cauda apresentada em (c) nas Figuras 35 a 38. A Figura 39 apresenta o comparativo das simulações obtidas pelo CTRW com os resultados dos experimentos desenvolvidos por Lucas (2016), em concentrações relativas.

Figura 39. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$.



Fonte: Autor (2023).

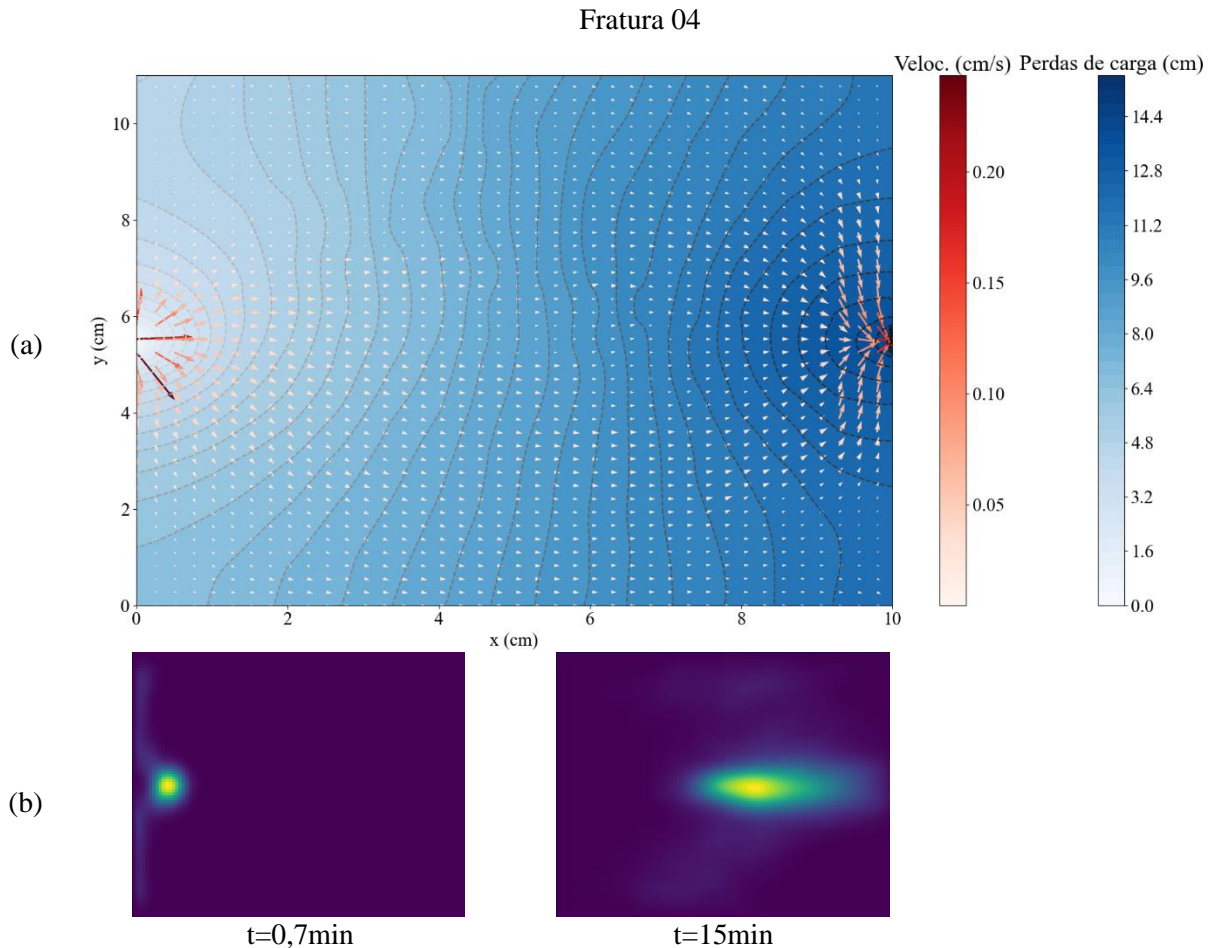
As simulações não foram capazes de representar corretamente nenhuma característica da curva experimental (tempo e concentração de pico, formato e concentrações da cauda). A concordância não foi satisfatória, com um coeficiente de determinação nulo. As curvas fornecidas pelo CTRW superestimaram a concentração de pico, deslocado para a esquerda, apresentando uma ascensão precoce com uma diferença média de 13 min no pico e 70 min no tempo de residência. Como o principal dado de entrada do modelo CTRW é o campo de velocidades, pode-se concluir que as diferenças encontradas estão relacionadas a este, onde é possível supor que os valores simulados estão superestimados em relação aos valores reais do escoamento na fratura, assim como discutido em Lucas, Cantareira e Wendland (2019). Além disso, a orientação dos vetores de velocidade influencia nos caminhos percorridos pelas partículas, e conseqüentemente as concentrações da curva de passagem (MAJUMDER e ELDHO, 2017; HANSEN e BERKOWITZ, 2020b). Uma vez que o campo de velocidade é calculado em função da solução dos elementos analíticos que representam a heterogeneidade das aberturas (ou condutividades), a ampliação do número de *line-doublers* poderia influenciar na diminuição das diferenças obtidas nas curvas de passagem, principalmente em uma situação onde os valores das condutividades hidráulicas sejam, em média, menores.

Para avaliar a influência do número de elementos analíticos nos resultados, foi realizada a simulação do escoamento na Fratura 04, para a vazão de $3,0 \text{ mL.h}^{-1}$, considerando a utilização

900 elementos analíticos (superior ao dobro utilizado nos casos anteriores). Os resultados são apresentados nas Figuras 40.

Figura 40. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$ utilizando 900 *line-doublers*:

(a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes.

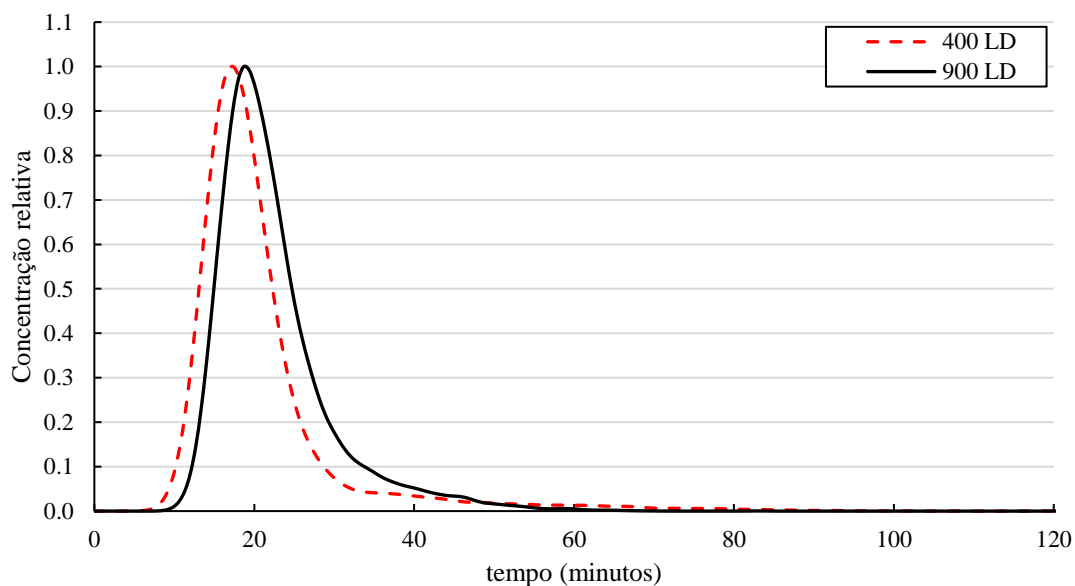


Fonte: Autor (2023).

A comparação entre as Figuras 38 e 40 permite observar alterações nas isolinhas de perda de carga e canais preferenciais. Entretanto, as plumas de dispersão se mantêm similares em relação ao fluxo principal, onde em ambas ocorre pela região central da fratura. As diferenças significativas podem ser identificadas em termos quantitativos, na redução das velocidades e no valor de perda de carga entre a entrada e saída da fratura. O valor médio da velocidade é reduzido de $1,46 \text{ cm.min}^{-1}$ para $1,43 \text{ cm.min}^{-1}$, assim como as perdas de carga, de 18 cm para 15 cm, mas se mantendo próximos aos valores da Tabela 2. As alterações nas velocidades também podem ser observadas nas Figuras 38b e 40b, onde para o mesmo instante registrado, as partículas na Figura 40b estão “atrasadas”. Na Figura 41 pode-se observar o impacto na curva de passagem ao se utilizar 900 *line-doublers* em comparação com a Figura 38c (400 *line-doublers*). Alterações na concentração de pico, formato e concentrações da cauda

não são perceptíveis (com exceção da concentração relativa no instante 33,5 min). Entretanto, um deslocamento para a direita em 3 minutos (aproximadamente) pode ser notado. Isto evidencia que a utilização de um número maior de elementos analíticos pode reduzir as diferenças observadas na Figura 39.

Figura 41. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW com 400 *line-doublets* (400 LD) e 900 *line-doublets* (900 LD), para $Q = 3,0 \text{ mL.h}^{-1}$.



Fonte: Autor (2023).

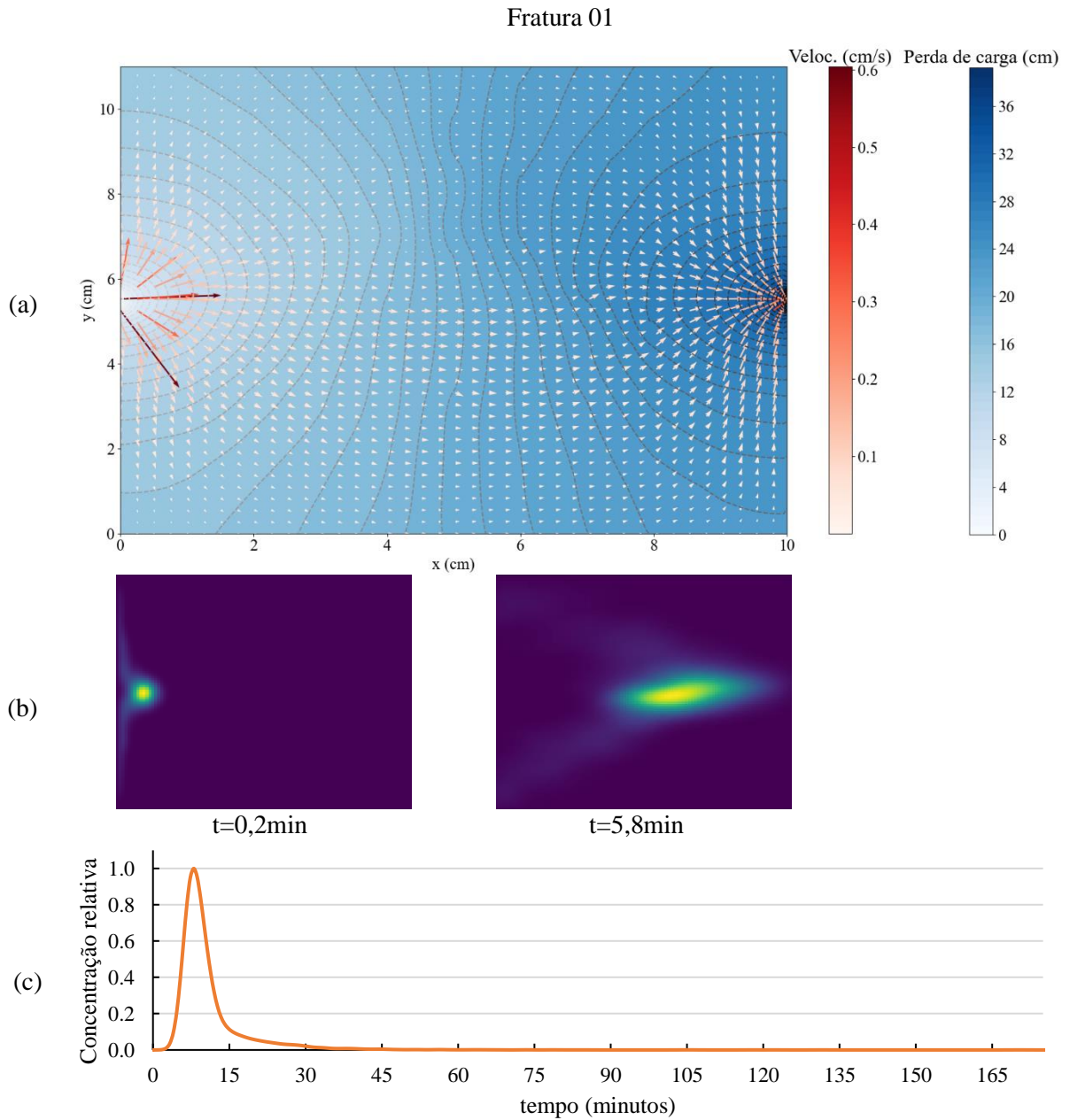
Entretanto, a utilização de 900 elementos analíticos eleva o tempo de processamento de 79 min, valor médio para todas as simulações com 400 *line-doublets*, para 249 min. Essa diferença se refere apenas à construção da matriz, pois na solução pelo método de Gauss-Seidel a alteração é de 1,6 min (valor médio) para 7,0 min. No que se refere à matriz para a solução com 400 *line-doublets*, a quantidade de linhas×colunas (2807×2807) totaliza $7,8 \cdot 10^6$ elementos. Esta quantidade se eleva para $4,0 \cdot 10^7$ ao utilizar 900 elementos. Ou seja, o método matricial utilizado se torna impraticável para valores mais elevados de elementos analíticos, como por exemplo, considerando 10.000 *line-doublets* ($4,9 \cdot 10^9$ elementos), a construção da matriz requer uma quantidade elevada de memória, próximo a 25 gigas de RAM.

5.2.2. $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$

As Figuras 42 a 45 apresentam os resultados para a vazão de injeção de $5,7 \text{ mL.h}^{-1}$, utilizando 400 *line doublets*, nas quais em (a) são apresentados os resultados da solução do fluxo pelos elementos analíticos, em termos de perda de carga e velocidade, em (b) a localização

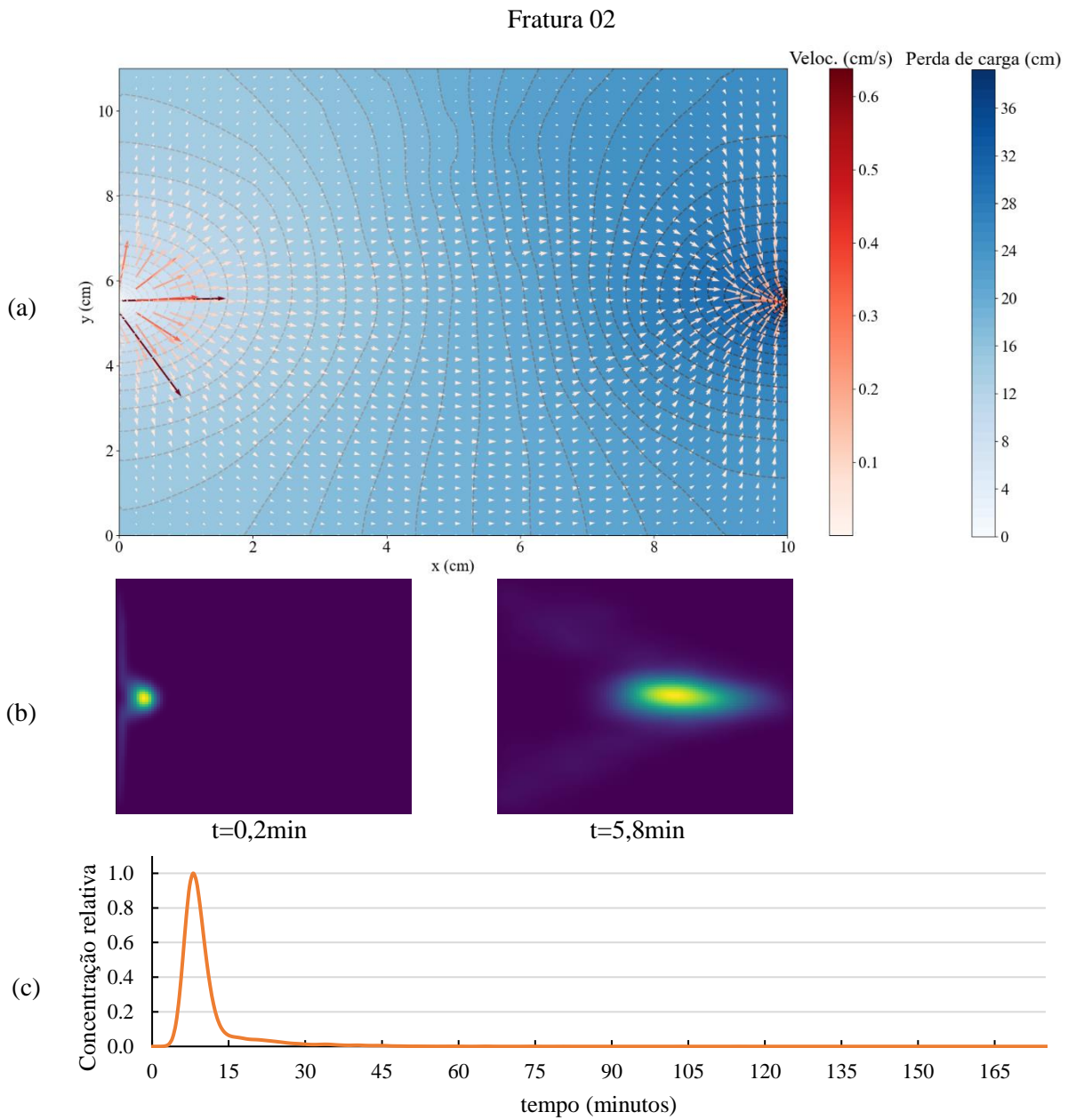
das partículas do modelo CTRW nos instantes adotados, e em (c) as curvas de passagem em concentrações relativas.

Figura 42. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



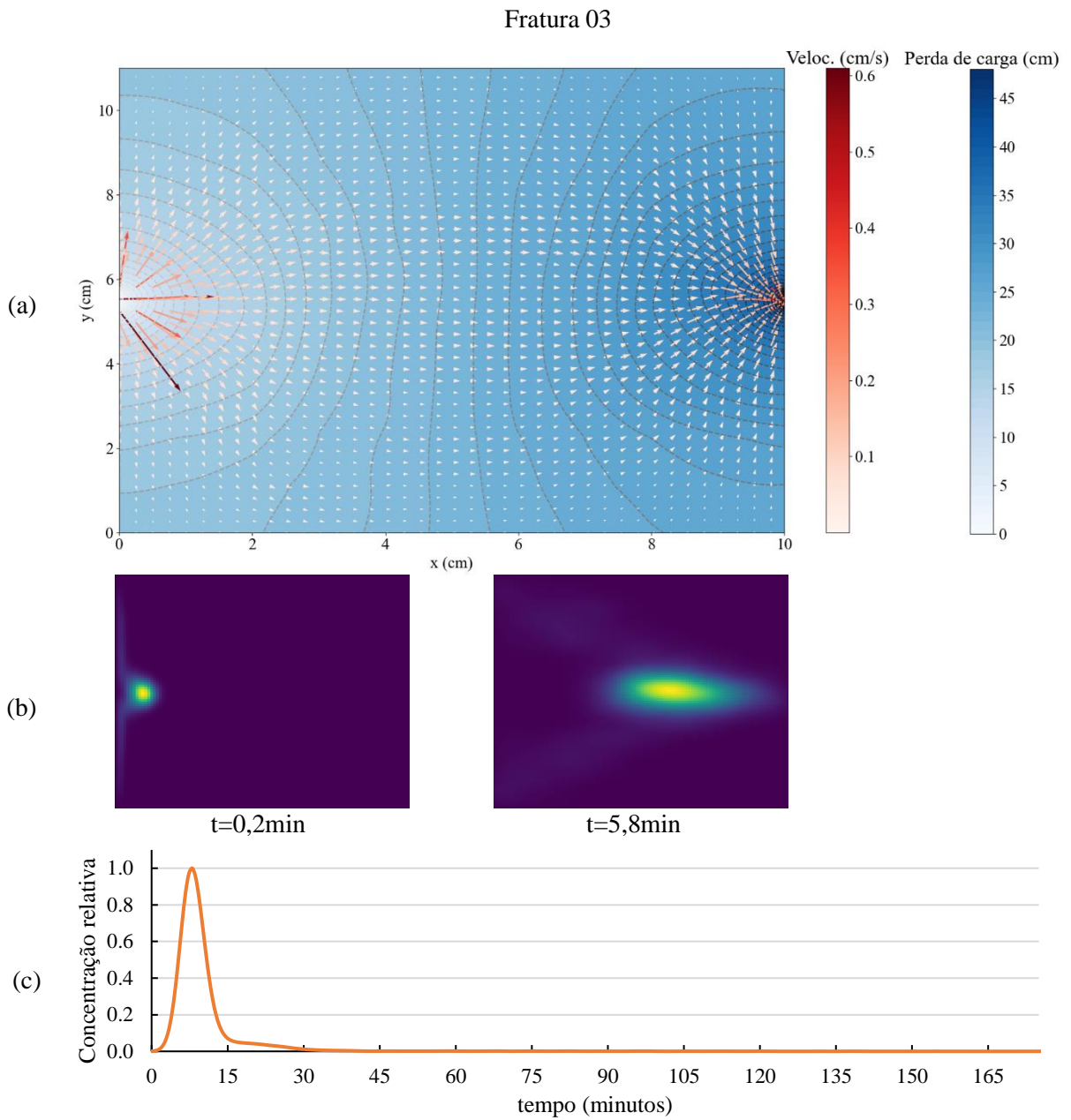
Fonte: Autor (2023).

Figura 43. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



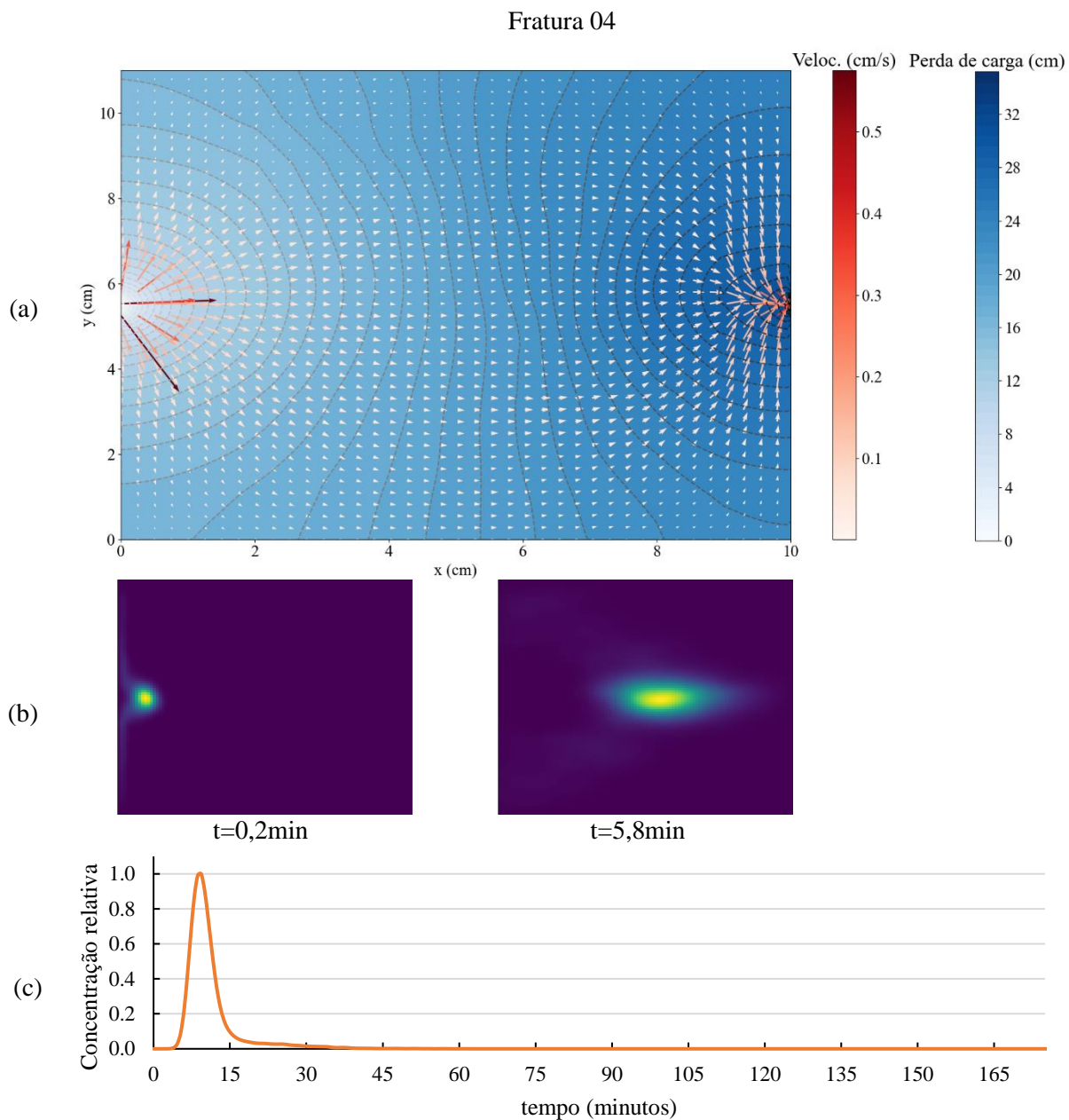
Fonte: Autor (2023).

Figura 44. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

Figura 45. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.

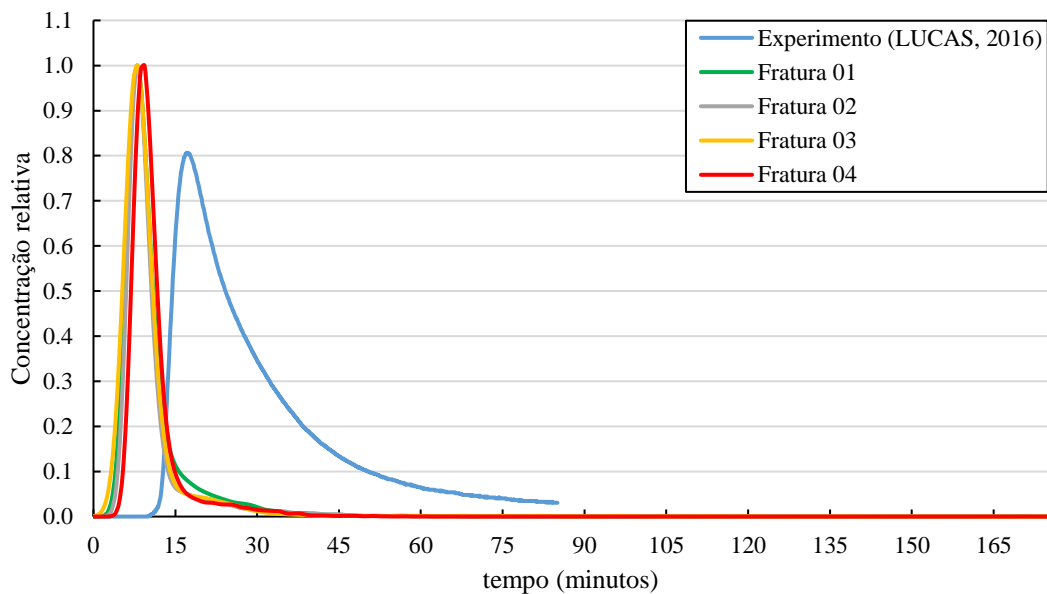


Fonte: Autor (2023).

Para $Q = 5,7 \text{ mL.h}^{-1}$, o comportamento do fluxo, em termos de caminhos preferenciais, se mantém praticamente idêntico à vazão avaliada no item anterior. As alterações observadas ocorrem em aspectos quantitativos, nas perdas de carga, com valores simulados de 32 cm a 45 cm, aproximadamente, e velocidade média, com valores entre $2,79 \text{ cm.min}^{-1}$ a $2,85 \text{ cm.min}^{-1}$. As perdas de carga simuladas se mantêm próximas ao valor observado de 51 cm, assim como a velocidade média, estimada entre $0,84 \text{ cm.min}^{-1}$ e $14,90 \text{ cm.min}^{-1}$ (Tabela 2). No caso da velocidade média, o valor considerado o mais próximo da realidade por Lucas, Cantareira e

Wendland (2019) seria de $0,84 \text{ cm}\cdot\text{min}^{-1}$, 3 vezes menor que aqueles obtidos nas simulações pelo MEA. Considerando os efeitos de dispersão ilustrados em (b) nas Figuras 42 a 45, pode-se observar uma boa concordância com os caminhos preferenciais obtidos nos campos de velocidade (Figuras 42a, 43a, 44a e 45a). As curvas de passagem resultantes de cada simulação são apresentadas em (c) nas Figuras 42 a 45. Novamente, valores superestimados nos campos de velocidade podem ser o principal fator de influência nas discrepâncias obtidas entre as curvas de passagem estimadas pelo modelo e medidas pelo experimento com o traçador (Figura 46). As curvas de passagem obtidas pelo CTRW não foram capazes de representar o tempo e concentração de pico, formato e concentrações da cauda, com um coeficiente de determinação praticamente nulo. Assim como no caso anterior, as curvas de passagem superestimaram a concentração de pico com uma ascensão precoce, entretanto com uma diferença média menor, igual a 9 min no pico e 35 min no tempo de residência (considerando valores significativos de concentração nas simulações como $\geq 10^{-4}$).

Figura 46. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 5,7 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$.

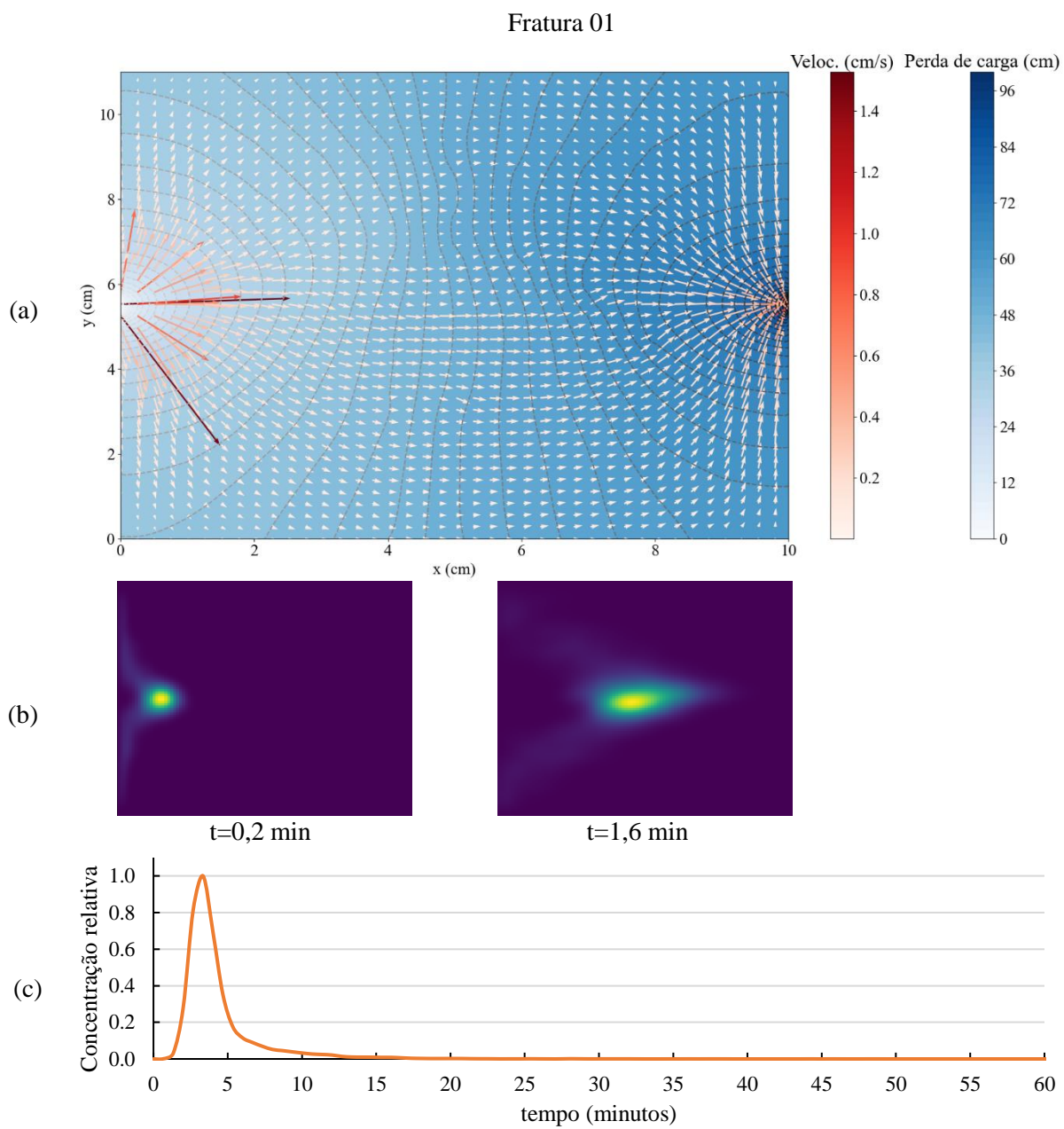


Fonte: Autor (2023).

5.2.3. $Q = 14,3 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$

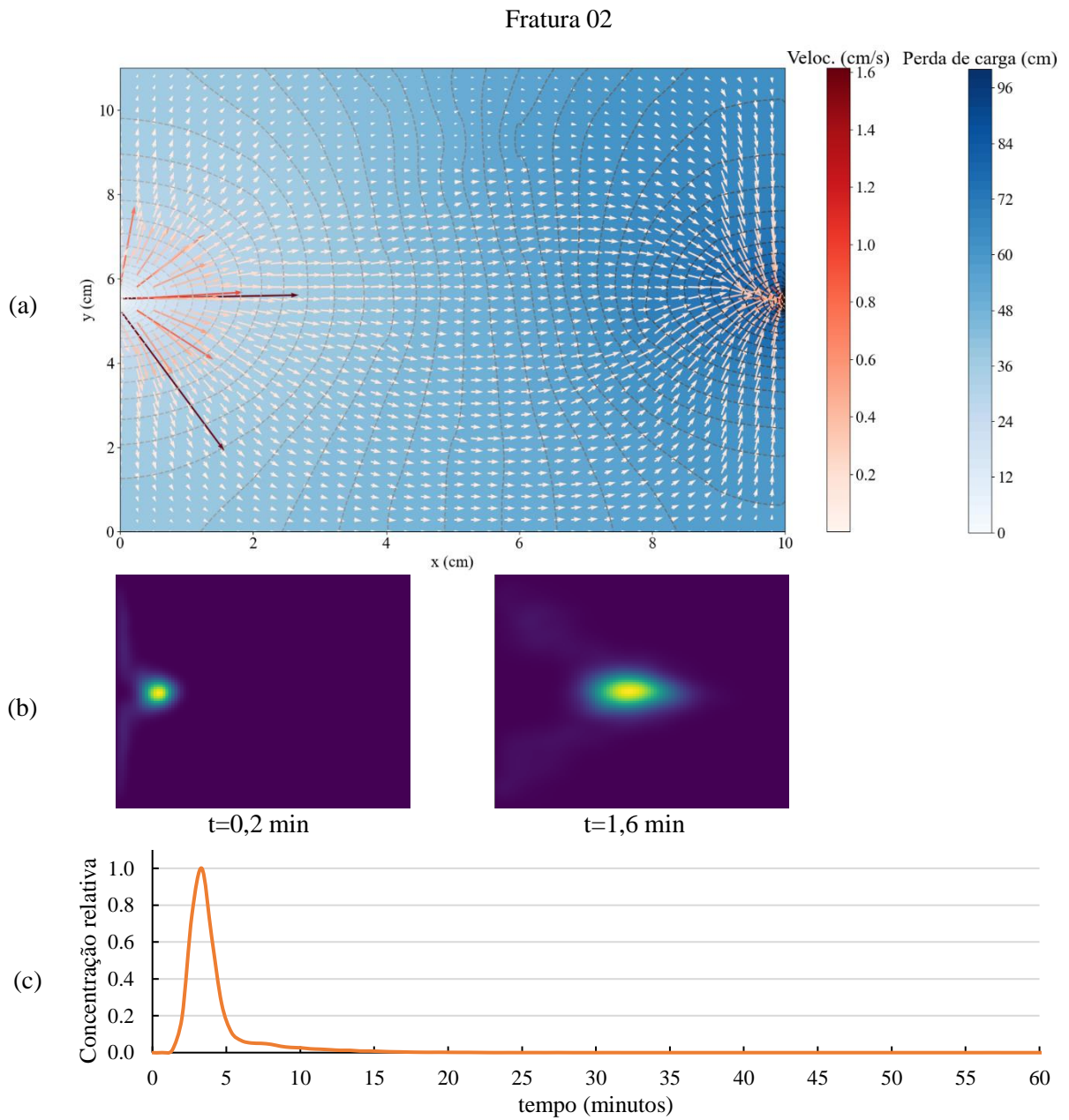
As Figuras 47 a 50 apresentam os resultados para a vazão de injeção de $14,3 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$. Em (a) são apresentadas as perdas de carga e campos de velocidade obtidos pela solução do fluxo pelo MEA, em (b) são ilustradas a dispersão das partículas pelo algoritmo CTRW nos instantes adotados, e em (c) as curvas de passagem em concentrações relativas.

Figura 47. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



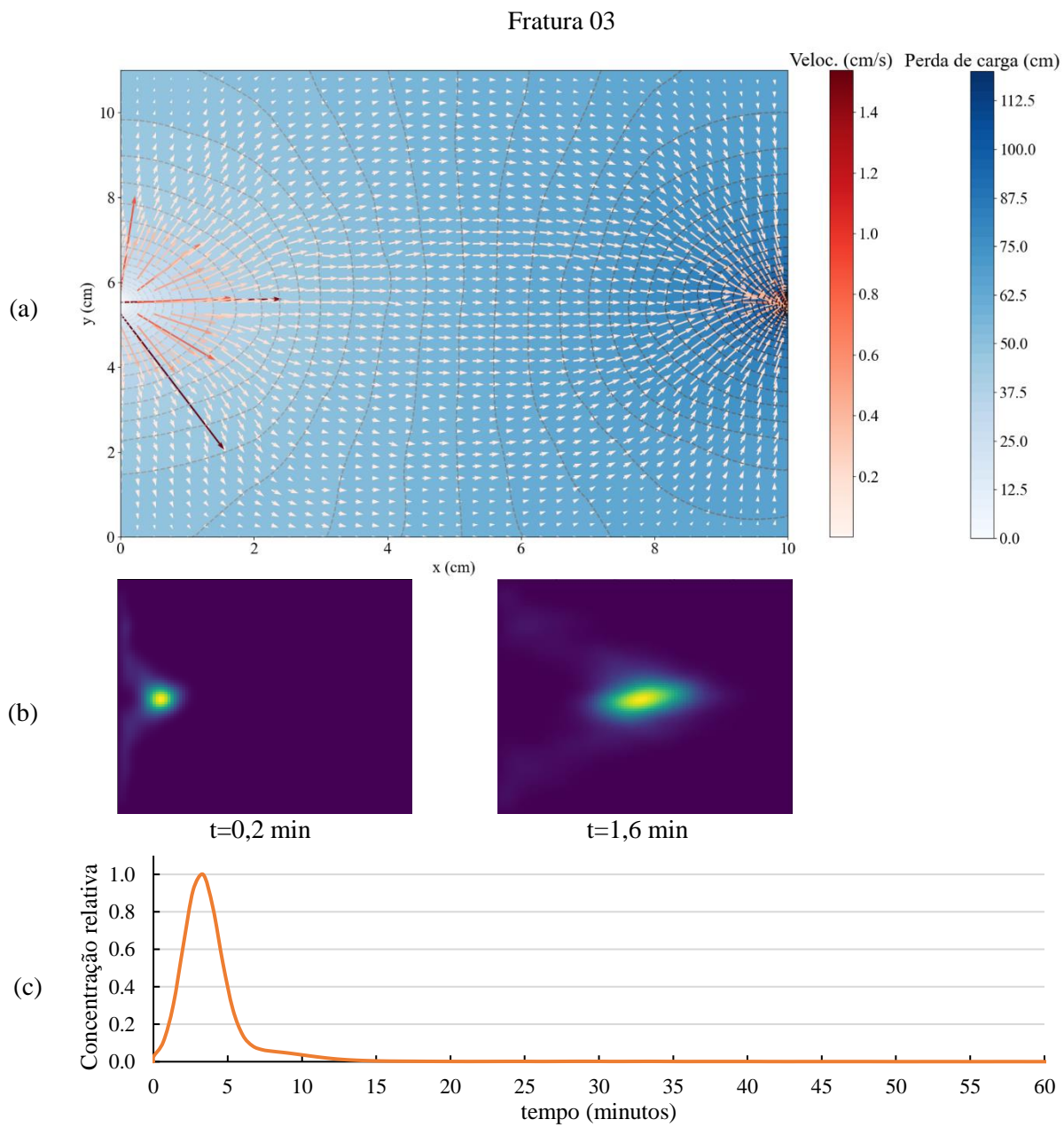
Fonte: Autor (2023).

Figura 48. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 14,3 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



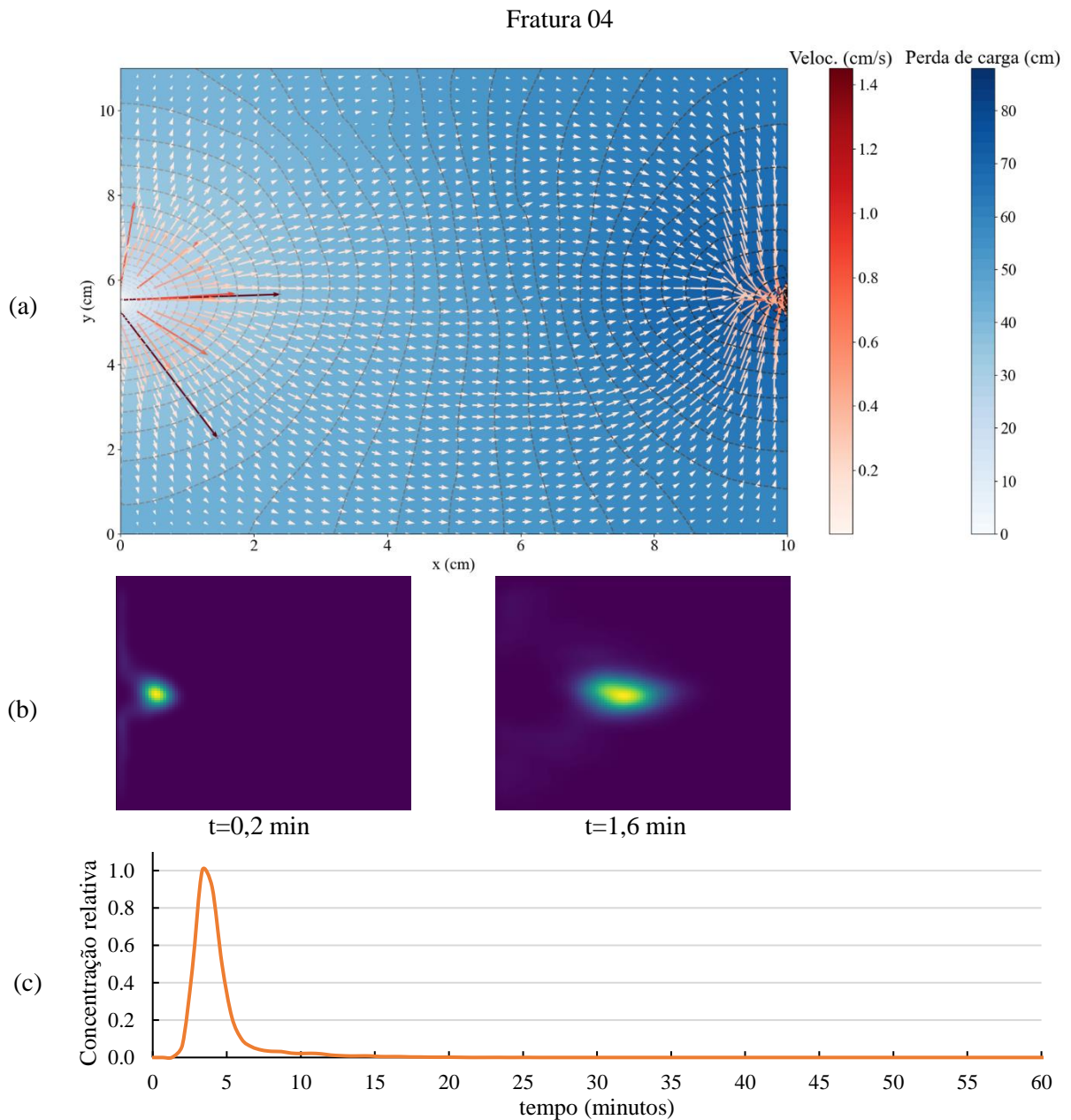
Fonte: Autor (2023).

Figura 49. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 14,3 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

Figura 50. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



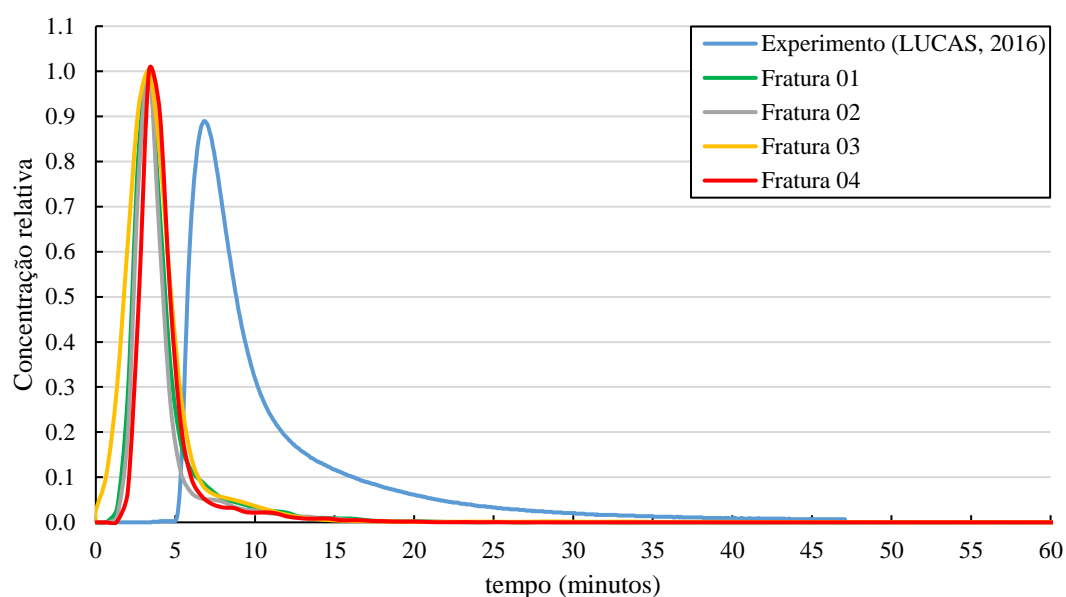
Fonte: Autor (2023).

A vazão $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$ aparentemente resulta, conforme as Figuras 47a, 48a, 49a e 50a em uma uniformidade dos campos de velocidade ao longo das fraturas. Em (c) nas Figuras 47 a 50, é possível observar que os canais preferenciais se mantêm similares àqueles obtidos pelas vazões de $3,0 \text{ mL.h}^{-1}$ e $5,7 \text{ mL.h}^{-1}$. A uniformidade dos vetores deriva apenas da magnitude dos valores das velocidades, superiores às situações apresentadas nos itens 5.2.1 e 5.2.2. O valor médio das velocidades para $Q = 14,3 \text{ mL.h}^{-1}$ é igual a $7,0 \text{ cm.min}^{-1}$, dentro do intervalo estimado por Lucas, Cantareira e Wendland (2019) (Tabela 2), mas superior ao limite

mínimo de $2,4 \text{ cm}\cdot\text{min}^{-1}$, avaliado como a velocidade de maior precisão para este cenário. As perdas de carga simuladas entre a entrada e saída da fratura se mantêm próximas ao valor observado de 125 cm, com um intervalo de valores de 80 cm a 113 cm.

As curvas de passagem para cada fratura são apresentadas em (c) nas Figuras 47 a 50. Pode-se observar novamente que os resultados obtidos pelo modelo CTRW a partir dos campos de velocidade do MEA não foram capazes de representar corretamente o tempo e concentração de pico, formato e concentrações da cauda. Assim como nos casos anteriores, as curvas de passagem superestimaram a concentração de pico, embora em uma diferença menor, igual a 0,1 aproximadamente. A ascensão também ocorre de forma precoce, entretanto com uma diferença média menor, igual a 4 min no pico e 13 min no tempo de residência. Conforme discutido anteriormente, valores superestimados nos campos de velocidade podem ser o principal fator de influência nas discrepâncias obtidas, e apresentadas na Figura 51.

Figura 51. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 14,3 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$.

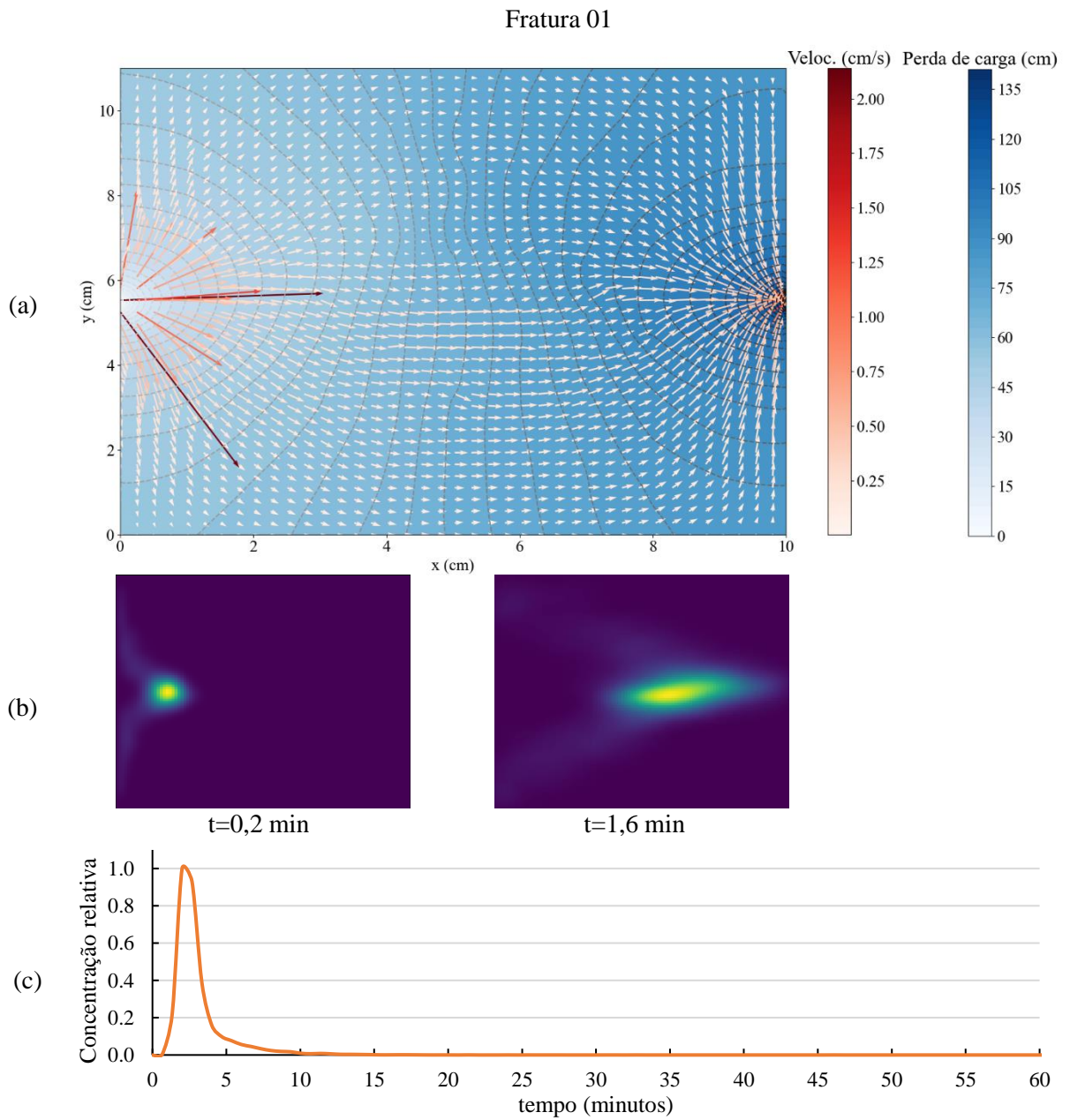


Fonte: Autor (2023).

5.2.4. $Q = 19,7 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$

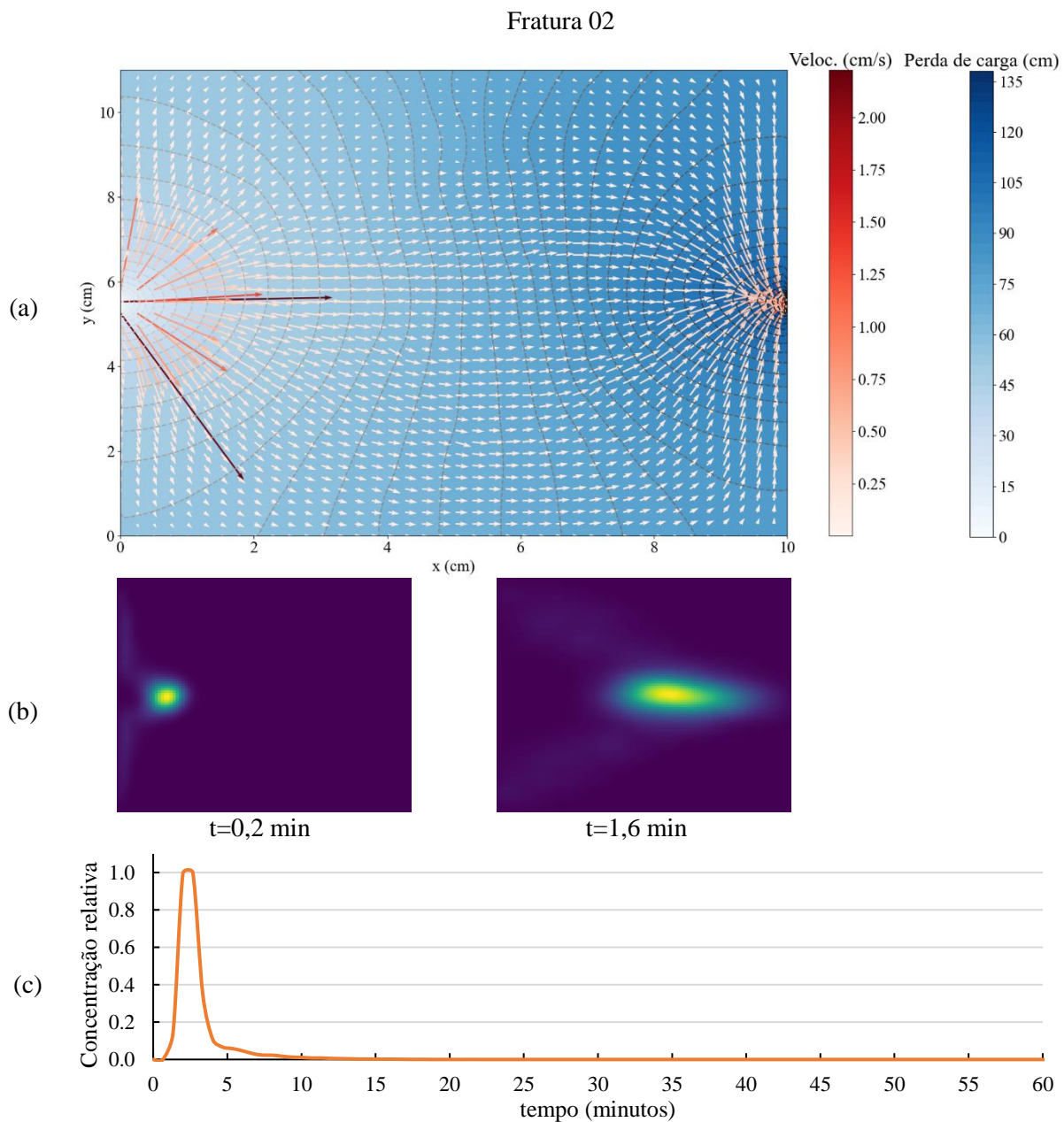
As Figuras 52 a 55 apresentam os resultados para a vazão de injeção $Q = 19,7 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$, nas quais em (a) são apresentados os resultados da solução do fluxo pelos elementos analíticos, em termos de perda de carga e velocidade, em (b) a localização das partículas do CTRW nos instantes adotados, e em (c) as curvas de passagem em concentrações relativas.

Figura 52. Simulação do escoamento na fratura 01 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



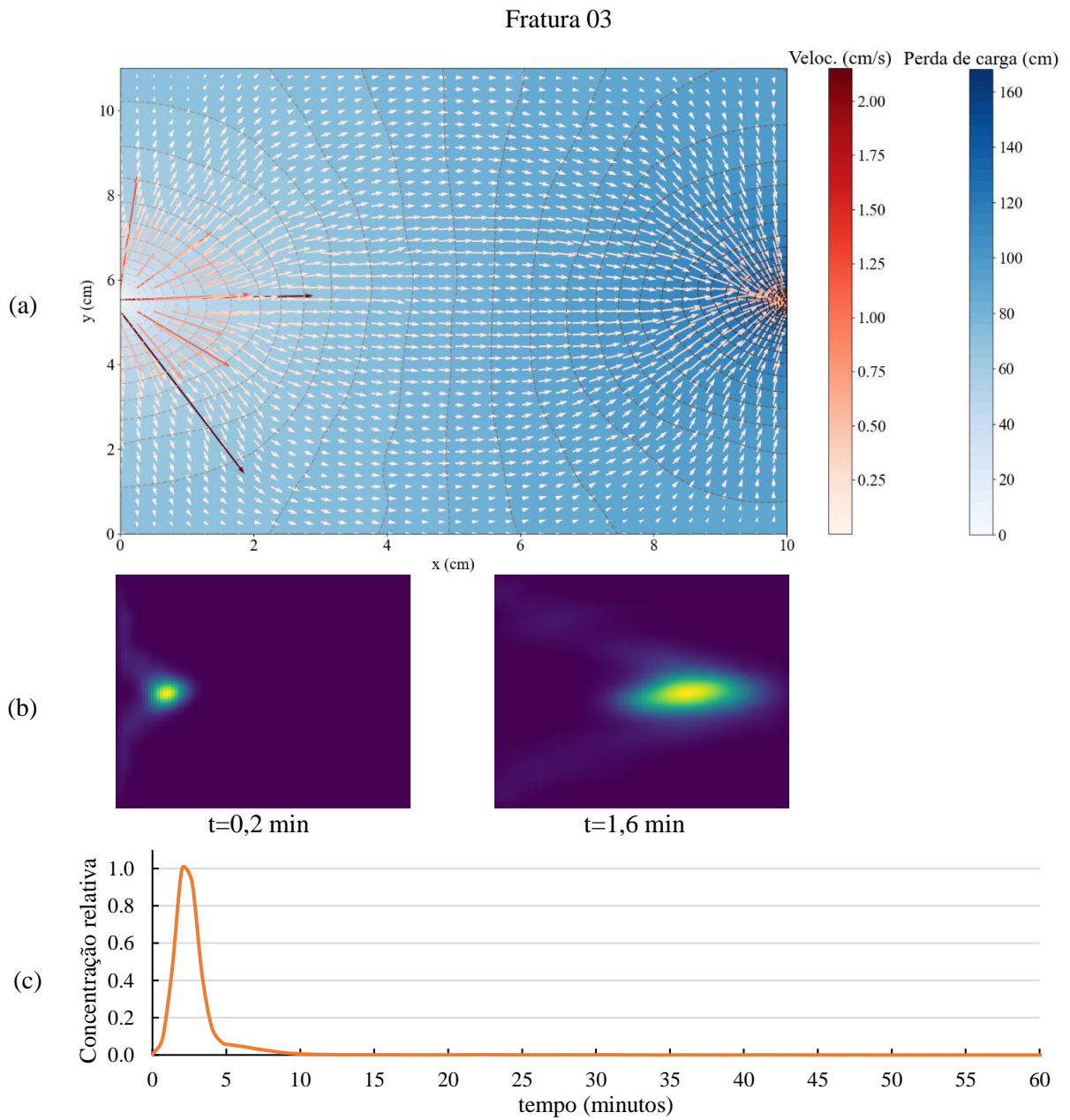
Fonte: Autor (2023).

Figura 53. Simulação do escoamento na fratura 02 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



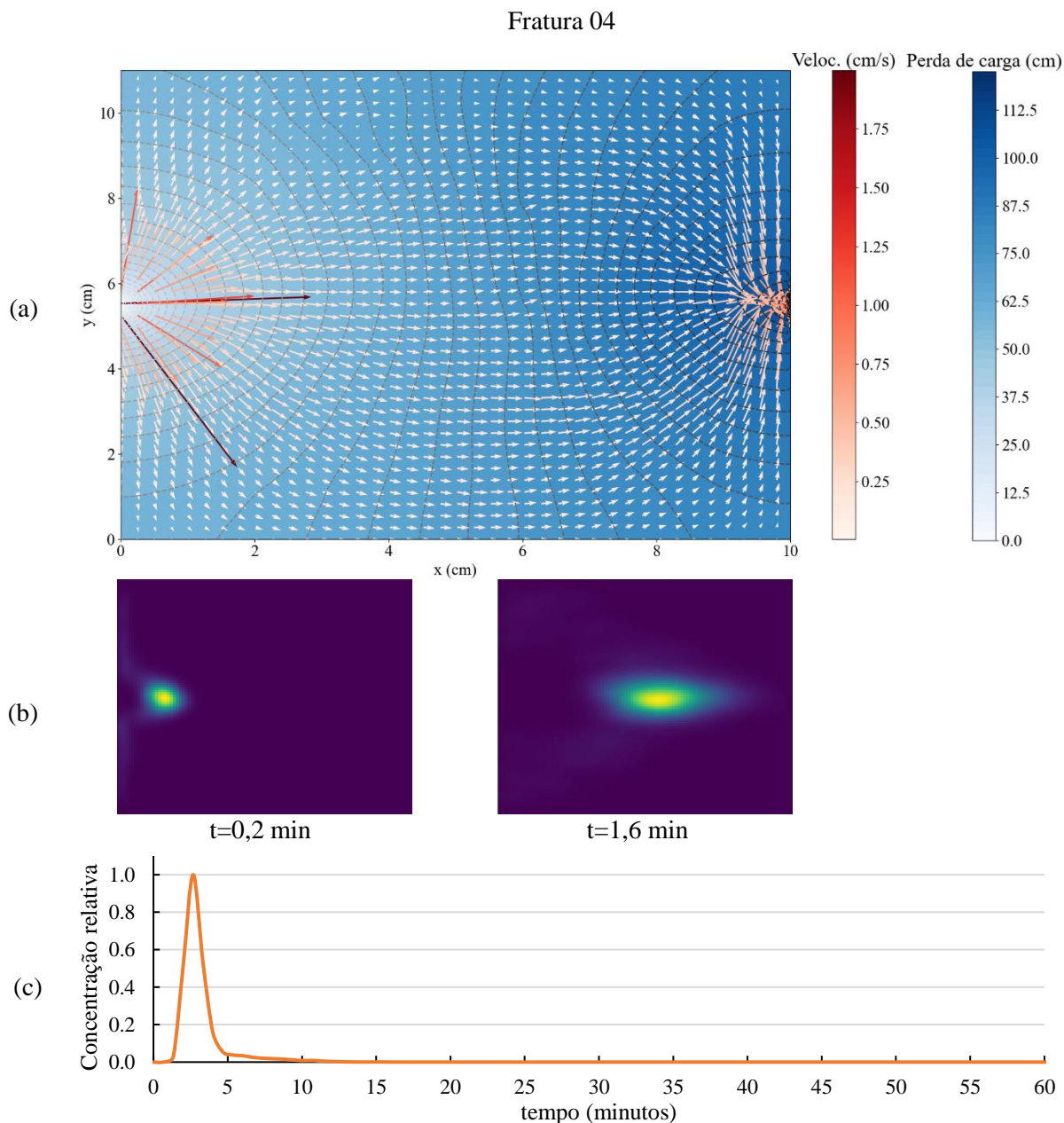
Fonte: Autor (2023).

Figura 54. Simulação do escoamento na fratura 03 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



Fonte: Autor (2023).

Figura 55. Simulação do escoamento na fratura 04 para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$: (a) as perdas de carga e vetores de velocidade, (b) dispersão das partículas em diferentes instantes e (c) curva de passagem.



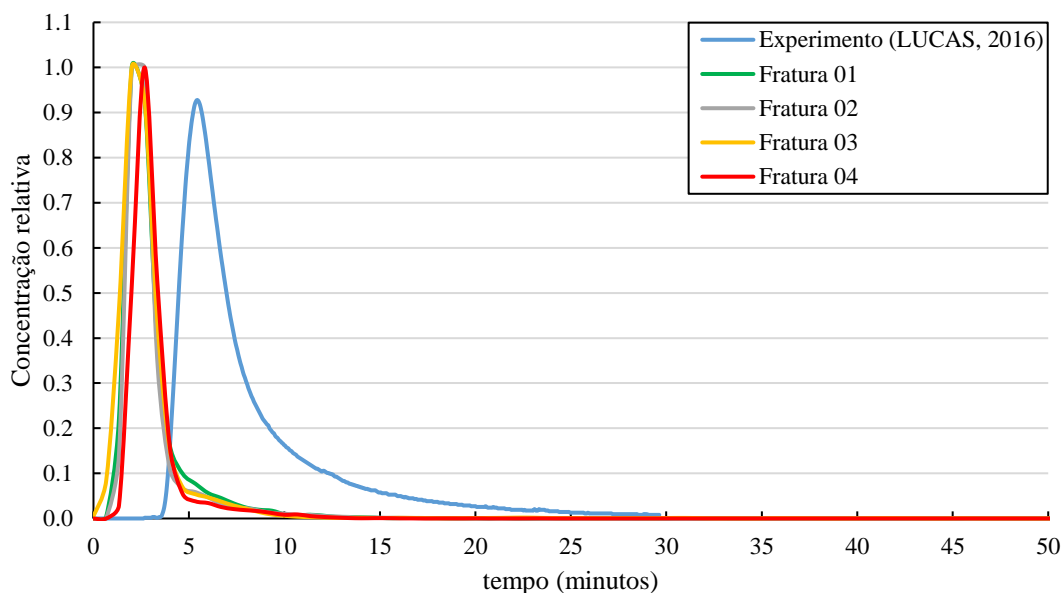
Fonte: Autor (2023).

Para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$, o comportamento do fluxo, em termos de caminhos preferenciais, é similar aos resultados do item 5.2.3. As alterações podem ser observadas de forma distinta nos valores de perda de carga, variando entre 113 cm a 160 cm, aproximadamente, e de velocidade, com valores médios entre $9,7 \text{ cm.min}^{-1}$ a $10,0 \text{ cm.min}^{-1}$. As perdas de carga simuladas se mantêm próximas ao valor observado de 173 cm, assim como a velocidade média, estimada entre $3,36 \text{ cm.min}^{-1}$, considerada aquela com maior precisão, e $47,48 \text{ cm.min}^{-1}$ (Tabela 2). Os efeitos de dispersão, ilustrados em (b) nas Figuras 52 a 55, apresentam uma boa

concordância com os caminhos preferenciais obtidos nos campos de velocidade. As curvas de passagem resultantes de cada simulação são apresentadas em (c) nas Figuras 52 a 55.

A Figura 56 ilustra as diferenças obtidas entre as curvas de passagem simuladas pelo modelo e monitoradas no experimento com o traçador. Apesar da possível superestimação dos valores dos campos de velocidade influenciarem nas discrepâncias observadas, estas apresentam as menores diferenças em termos de tempo e concentração de pico, iguais a 3,3 min e 0,08, respectivamente. Quanto ao tempo de residência, a diferença pode ser considerada igual a 20 min, principalmente pela longa cauda obtida nas curvas de passagem das simulações.

Figura 56. Comparação entre as curvas de passagem simuladas pelo CTRW e a obtida experimentalmente para $Q = 19,7 \text{ mL.h}^{-1}$.



Fonte: Autor (2023).

6. CONCLUSÕES

Esta pesquisa se propôs a realizar a integração de uma imagem micro-CT de uma fratura junto ao algoritmo *GMP Direct Sampling* para gerar padrões realísticos de abertura e utilizar tais informações como dado de entrada em um modelo de simulação do escoamento de água considerando de forma detalhada as heterogeneidades da fratura. O modelo construído foi baseado no MEA.

Primeiramente, uma análise de sensibilidade dos principais parâmetros do algoritmo DS foi realizada, com o objetivo de otimizar seu potencial dado o objetivo proposto. Os valores de t e n influenciam majoritariamente a qualidade das simulações, podendo garantir uma variabilidade suficiente entre as reproduções, evitando o fenômeno ‘*patching*’. Menores valores de t e maiores n resultam em cópias da IT, além de aumentar o tempo de processamento requerido. Ampliar a fração da IT a ser “escaneada” para valores $f \geq 0,25$ levam a resultados visuais e de desempenho de CPU similares a $n \geq 30$. A utilização de $n = 20$, $t = 0,25$ e $f = 0,1$ resultaram em simulações de alta qualidade, reproduzindo o padrão aleatório das aberturas de forma similar, sem regiões idênticas a IT. As métricas estatísticas revelaram que, com esta configuração, o DS consegue reproduzir as correlações espaciais em termos de variogramas e conectividade, assim como a distribuição de valores de abertura nos histogramas, embora com flutuações e desvios, considerados aceitáveis e dentro do esperado conforme discutido na literatura (MEERSCHMAN *et al.*, 2013). Esta configuração de parâmetros também permitiu ao DS expandir as dimensões das reproduções para valores maiores que a IT, conforme objetivo proposto.

O modelo MEA realizou a simulação dos experimentos de bancada de Lucas (2016), nos quais uma amostra de 11×10 cm com uma única fratura foi submetida a ensaios de curva de passagem. Para isso, as reproduções expandidas da imagem micro-CT pelo DS foram utilizadas como informações das heterogeneidades das aberturas da fratura.

Os resultados apresentaram uma boa concordância, em termos das perdas de carga e velocidades médias obtidas, ao se comparar com os valores registrados e estimados em Lucas, Cantareira e Wendland (2019), evidenciando que o modelo MEA foi capaz de simular quantitativamente o fluxo de água na fratura. Foi possível observar os possíveis canais preferenciais na fratura, tanto pelos vetores de velocidade quanto pela dispersão de partículas simuladas pelo CTRW. Pode-se concluir que o fluxo preferencial ocorre majoritariamente pela região central da fratura, possivelmente influenciado principalmente pelo eixo de injeção da água. No que se refere às curvas de passagem obtidas pelo CTRW, estas não foram capazes de

representar corretamente o tempo e concentração de pico, formato e concentrações da cauda da curva experimental. Os coeficientes de determinação foram praticamente nulos nas simulações obtidas. As curvas fornecidas pelo CTRW superestimaram a concentração de pico, deslocadas para a esquerda, apresentando ascensões precoces no pico e maiores tempo de residência.

As diferenças encontradas estão relacionadas aos campos de velocidade reproduzidos pelo MEA, onde é possível supor que os valores simulados estão superestimados. Em uma simulação pontual, a ampliação do número de *line-doublets* utilizados se mostrou uma possível solução para as diferenças obtidas nas curvas de passagem. Outro fator a ser considerado como possível causa das diferenças obtidas, seria que as reproduções da GMP dos valores de abertura de dimensões 2,8×2,4 cm para 10×11 cm não conseguiram simular de forma realista a variância e as estruturas presentes em uma fratura como a submetida aos experimentos de Lucas (2016).

O método de solução matricial utilizado se mostrou um limitante quanto ao uso de um número elevado de elementos analíticos, onde a busca por sua otimização e/ou métodos alternativos se enquadra como um objetivo futuro. De forma conjunta, a utilização de um modelo de advecção e/ou dispersão que melhor se ajuste a situação estudada deve ser testados/desenvolvido para ampliar a precisão do transporte de soluto.

Portanto, as conclusões desta pesquisa contribuem para a melhor compreensão do escoamento e transporte de soluto na fratura estudada ao incorporar a heterogeneidade das aberturas. Este pode ser considerado um avanço na pesquisa iniciada por Lucas (2016) na busca por um melhor entendimento do risco à contaminação do ASG.

6.1. PERSPECTIVAS FUTURAS

A solução do escoamento em uma fratura apresentada neste trabalho ainda pode ser melhorada ampliando a quantidade de *line-doublets* utilizados. Este próximo passo seria um problema de implementação computacional, visto que o desenvolvimento teórico se encontra estabelecido neste e em trabalhos anteriores (HUSSAIN, 2017; MARIN, 2011). A otimização do método matricial ou a utilização de métodos de solução alternativos que melhor se ajustem a problemas com um número significativo de elementos (≥ 10.000) poderiam melhorar o desempenho computacional. Por exemplo, a vetorização da matriz de solução pode acelerar o processo de simulação.

A relevância do estudo de transporte de solutos para escoamentos subterrâneos leva à sugestão do uso do modelo desenvolvido neste trabalho em integração com um modelo de transporte que melhor se ajuste a situação simulada, com um detalhamento mais realístico dos processos de advecção/dispersão.

Os resultados de MEA permitem uma análise visual do escoamento preferencial, assim como o modelo CTRW utilizado. A realização de experimentos de microtomografia de raios-X resolvida no tempo (*Time resolved X ray microtomography*), ou imageamento 4D, na linha de Luz Mogno do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em Campinas/SP, possibilitariam, além de dados complementares das curvas de passagem e mapeamento 3D da distribuição de aberturas, a obtenção de informações visuais do escoamento e transporte de solutos ao longo do tempo em uma fratura. Isto viabilizaria uma comparação detalhada entre os resultados do MEA e as imagens obtidas.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABDOLLAHIFARD, M. J.; FAEZ, K. Fast direct sampling for multiple-point stochastic simulation. **Arabian Journal of Geosciences**, v. 7, n. 5, p. 1927–1939, 2014.
- ALENCAR, M. F.; WENDLAND, E. C. Método de Elementos Analíticos: uma alternativa para a modelagem de escoamento subterrâneo. **Águas Subterrâneas**, v. 27, p. 110–124, 2013.
- ARPAT, G. B.; CAERS, J. Conditional simulation with patterns. **Mathematical Geology**, v. 39, n. 2, p. 177–203, 2007.
- ARPAT, G. B. **Sequential Simulation with Patterns**. p. 166, 2005.
- BACA, R. G.; ARNETT, R. C.; LANGFORD, D. W. Modelling fluid flow in fractured-porous rock masses by finite-element techniques. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 4, n. 4, p. 337–348, 1984.
- BADV, K.; DERISZADEH, M. Wellhead protection area delineation using the analytic element method. **Water, Air, and Soil Pollution**, v. 161, n. 1–4, p. 39–54, 2005.
- BAI, X.; JOSSERAND, J.; JENSEN, H.; ROSSIER, J. S.; GIRAULT, H. H. Finite element simulation of pinched pressure-driven flow injection in microchannels. **Analytical Chemistry**, v. 74, n. 24, p. 6205–6215, 2002.
- BAKKER, M.; STRACK, O. L. Analytic elements for multiaquifer flow. **Journal of Hydrology**, v. 271, n. 1–4, p. 119–129, 2003.
- BAKKER, M., NIEBER, J. L. Analytic Element Modeling of Cylindrical Drains and Cylindrical Inhomogeneities in Steady Two-Dimensional Unsaturated Flow. **Vadose Zone Journal**. 3:1038-1049, 2004.
- BANDILLA, K. W.; RABIDEAU, A. J.; JANKOVIC, I. 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, 2009.
- BARNES, R.; JANKOVIĆ, I. Two-dimensional flow through large numbers of circular inhomogeneities. **Journal of Hydrology**, v. 226, p. 204–210, 1999.
- BARNES, R.; STRACK, O. L.; JANKOVIC, I. The superblock approach for the analytic element method. **Journal of Hydrology**, v. 226, p. 179–187, 1999.
- BATISTA, J. A. N. Modelagem de **Escoamento em Aquíferos Longos Baseado no Método dos Elementos Analíticos**. 2006. 211 f. Tese (Doutorado em Ciências da Engenharia Ambiental) Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.
- BATISTA, J. A. N.; SCHULZ, H. E.; WENDLAND, E. Analytic Element Model for groundwater flow in the aquifers' recharge zone - part 1: unconfined coastal aquifers. In: **XXIV Congresso Íbero-Latino Americano de Métodos Computacionais para Engenharia**, 2003, Ouro Preto: UFOP, 2003.
- BATISTA, J. A. N.; WENDLAND, E.; SCHULZ, H. E. Acoplamento de Expressão Unidimensional de Recarga a Modelos de Elementos Analíticos. **Tendências em Matemática Aplicada e Computacional**, v. 6, n. 1, p. 43-53, 2005.
- BELCHER, W. R.; WELCH, A. H. Ground-Water Flow Modeling by the U . S . **Geological Survey in Nevada : Uses and Approaches**. p. 1–6, 2006.
- BERTELS, S.P.; DICARLO, D.A.; BLUNT, M.J. 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. 2001.
- BODIN, J.; DELAY, F.; DE MARSILY, G. Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 2. mathematical formalism. **Hydrogeology Journal**, 11(4), 434-454, 2003.
- BOICO, V. F. **Modelo analítico para a avaliação do escoamento de água no Aquífero Guarani em**

- Bauru/SP.** 2017, 127 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Hidráulica e Saneamento) Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.
- BOICO, V. F.; WENDLAND, E.; BATISTA, J. A. N. Assessment of the potentiometric drawdown in the Guarani Aquifer System in Bauru / SP by a model of analytical elements. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 23, 2018.
- BONNET, E.; BOUR, O.; ODLING, N. E.; DAVY, P.; MAIN, I.; COWIE, P.; BERKOWITZ, B. Scaling of fracture systems in geological media. **Reviews of Geophysics**, v. 39, n. 3, p. 347-383, 2001.
- BOTHA, P. W.; SHEPPARD, A. P. Mapping permeability in low-resolution micro-CT images: A multiscale statistical approach. **Water Resources Research**, v. 52(6), p. 4377-4398, 2016.
- BOUCHER, A. Considering complex training images with search tree partitioning. **Computers and Geosciences**, v. 35, n. 6, p. 1151-1158, 2009.
- CAERS, J. **Petroleum Geostatistics**. Society of Petroleum Engineers. Richardson, 2005.
- CARDENAS, M. B.; SLOTTKE, D. T.; KETCHAM, R. A.; SHARP, J. M. 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, 2007.
- CHEN, Y.; DURLOFSKY, L.J.; GERRITSEN, M.; WEH, X.H. A coupled local-global upscaling approach for simulating flow in highly heterogeneous formations. **Advances in Water Resources**, v. 26, p. 1041-1060, 2003.
- CODINA, R. Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 191, n. 39-40, p. 4295-4321, 2002.
- CORDES, C.; KINZELBACH, W. Continuous groundwater velocity fields and path lines in linear, bilinear, and trilinear finite elements. **Water resources research**, v. 28(11), p. 2903-2911, 1992.
- CVETKOVIC, V.; FIORI, A.; DAGAN, G. Tracer travel and residence time distributions in highly heterogeneous aquifers: coupled effect of flow variability and mass transfer. **J. Hydrol.** v. 543, p. 101-108, 2016.
- DALY, C.; MARIETHOZ, G. Recent advances and developments in MPS. **73rd EAGE Conference and Exhibition incorporating SPE EUROPEC 2011**. EAGE Publications BV, 2011.
- DEUTSCH, C.V.; JOURNEL, A.G. **GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide**. 2nd ed., Oxford University Press, New York, 1998.
- DIJK, P.; BERKOWITZ, B.; BENDEL, P. Investigation of flow in water-saturated rock fractures using nuclear magnetic resonance imaging (NMRI). **Water Resources Research**, v. 35, n. 2, p. 347-360, 1999.
- DRIPPS, W. R.; HUNT, R. J.; ANDERSON, M. P. Estimating recharge rates with analytic element models and parameter estimation. **Ground Water**, v. 44, n. 1, p. 47-55, 2006.
- FAYBISHENKO, B.; WITHERSPOON, P. A.; BENSON, S. M. Dynamics of fluids in fractured rock. **Washington DC American Geophysical Union Geophysical Monograph Series**, v. 122, 2000.
- FREDRICK, K. C.; M. W. BECKER; D. M. FLEWELLING; SILAVISESRITH, W.; HART, E. R. Enhancement of aquifer vulnerability indexing using the analytic-element method. **Environmental Geology**, v. 45, n. 8, p. 1054-1061, 2004.
- GAUR, S.; CHAHAR, B. R.; GRAILLOT, D. Analytic elements method and particle swarm optimization based simulation-optimization model for groundwater management. **Journal of Hydrology**, v. 402, n. 3-4, p. 217-227, 2011.
- GENE, H. G.; CHARLES, F. **Matrix computations**. Johns Hopkins Universtiy Press, 3rd edition, 1996.
- GOMES, C. C. **Método dos Elementos Analíticos para Modelagem Matemática de Fluxo Hídrico Subterrâneo Regional**. Fortaleza: 2002, 123 f. Tese (Doutorado em Hidráulica), Universidade Federal

do Ceará, Ceará, Brasil.

GOMES, C. C.; CASTRO, M. A. H. Análise comparativa entre a modelagem de aquíferos regionais utilizando o Método de Elementos Analíticos (Split) e o Método de Diferenças Finitas (Modflow). **XII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas**, n. 1, p. 1–16, 2002.

GOMES, C. C.; CASTRO, M. A. H. Uma Introdução aos Fundamentos Matemáticos do Método dos Elementos Analíticos. **XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas**, n. 085, p. 1–24, 2004.

GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J.; SRIVASTAVA, R. M. ISIM3D: An ANSI-c three-dimensional multiple indicator conditional simulation program. **Computers & Geosciences**, v. 16(4), p. 395–440, 1990.

GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J.J.; SAHUQUILLO, A.; CAPILLA, J.E. Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - I. Theory. **Journal of Hydrology**, v. 203, n. 1-4, 1997.

GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J.; FRANSSEN, H. J. H.; CASSIRAGA, E. F. Stochastic analysis of flow response in a three-dimensional fractured rock mass block. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, v. 38, n. 1, p. 31–44, 2001.

GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. Book review. **Computers & Geosciences**, v. 83, p. 231–235, 2015.

GOUZE, P.; NOIRIEL, C.; BRUDERER, C.; LOGGIA, D.; LEPROVOST, R. X-ray tomography characterization of fracture surfaces during dissolution. **Geophysical Research Letters**, v. 30, n. 5, p. 71-74, 2003.

GUARDIANO, F. B.; SRIVASTAVA, R. M. Multivariate Geostatistics: Beyond Bivariate Moments. **Applied Earth Sciences Department**, Stanford, USA, p. 133–144, 1993.

HAKAMI, E. V.A.; LARSSON, E. Aperture measurements and flow experiments on a single natural fracture. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics**, v. 33, n. 4, p. 395–404, 1996.

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

HANSEN, S.K. Simplified calibration of continuous-time random walk solute transport models. **Adv. Water Resour.** v. 137, p. 103521, 2020.

HANSEN, S.K.; BERKOWITZ, B. Interpretation and nonuniqueness of CTRW transition distributions: insights from an alternative solute transport formulation. **Adv. Water Resour.** v. 74, p. 54–63, 2014.

HANSEN, S. K.; BERKOWITZ, B. Modeling non-Fickian solute transport due to mass transfer and physical heterogeneity on arbitrary groundwater velocity fields. **Water Resources Research**, v. 56(10), 2020a.

HANSEN, S. K.; BERKOWITZ, B. Aurora: A non-Fickian (and Fickian) particle tracking package for modeling groundwater contaminant transport with MODFLOW. **Environmental Modelling & Software**, v. 134, p. 104871, 2020b.

HERRERA, P. A.; MASSABÓ, M.; BECKIE, R. D. A meshless method to simulate solute transport in heterogeneous porous media. **Advances in Water Resources**, v. 32, n. 3, p. 413–429, 2009.

HOTEIT, H.; FIROOZABADI, A. Numerical modeling of two-phase flow in heterogeneous permeable media with different capillarity pressures. **Advances in water resources**, v. 31(1), p. 56-73, 2008.

HONARKHAH, M.; CAERS, J. Stochastic simulation of patterns using distance-based pattern modeling. **Mathematical Geosciences**, v. 42, p. 487-517, 2010.

HUANG, T.; LI, X.; ZHANG, T.; *et al.* GPU-accelerated Direct Sampling method for multiple-point statistical simulation. **Computers and Geosciences**, v. 57, p. 13–23, 2013.

HUBER, F.; ENZMANN, F.; WENKA, A.; BOUBY, M.; DENTZ, M.; SCHÄFER, T. Natural microscale heterogeneity induced solute and nanoparticle retardation in fractured crystalline rock. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 133, n. 0, p. 40-52, 2012.

- HUNT, R. Analytical Groundwater Mechanics. **Groundwater**, 2018.
- HUNT, R. J. Ground water modeling applications using the analytic element method. **Ground Water**, v. 44, n. 1, p. 5–15, 2006.
- HUSSAIN, S. M. **Simulation of groundwater flow by the analytic element method**. 2017, 135 f. Tese (Doutorado em Ciências de Computação e Matemática Computacional), Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.
- HUYSMANS, M.; DASSARGUES, A. Application of multiple-point geostatistics on modelling groundwater flow and transport in a cross-bedded aquifer (Belgium). **Hydrogeology Journal**, v. 17, p. 1901-1911, 2009.
- ISHIBASHI, T.; WATANABE, N.; HIRANO, N.; OKAMOTO, A.; TSUCHIYA, N. Beyond-laboratory-scale prediction for channeling. **Journal of Geophysical Research: Solid Earth**, p. 1–19, 2014.
- JHA, S. K.; MARIETHOZ, G.; EVANS, J. P.; MCCABE, M. F. Demonstration of a geostatistical approach to physically consistent downscaling of climate modeling simulations. **Water Resources Research**, v. 49, n. 1, p. 245–259, 2013.
- KARIMPOULI, S., TAHMASEBI, P., RAMANDI, H. L., MOSTAGHIMI, P., SAADATFAR, M. Stochastic modeling of coal fracture network by direct use of micro-computed tomography images. **International Journal of Coal Geology**, v. 179, n. April, p. 153–163, 2017.
- KARPYN, Z.T.; GRADER, A.S.; HALLECK, P.M. Visualization of fluid occupancy in a rough fracture using micro-tomography. **Journal of Colloid and Interface Science**, v.307, p.181-187. 2007.
- KARPYN, Z. T.; ALAJMI, A.; RADAELLI, F.; HALLECK, P. M.; GRADER, A. S. X-ray CT and hydraulic evidence for a relationship between fracture conductivity and adjacent matrix porosity. **Engineering Geology**, v. 103(3-4), p. 139-145, 2009.
- KELLER, A. A.; ROBERTS, P. V.; KITANIDIS, P. K. Prediction of single phase transport parameters in a variable aperture fracture. **Geophysical Research Letters**, v. 22, n. 11, p. 1425-1428, 1995.
- KELLER, A.A.; ROBERTS, P.V.; BLUNT, M.J. Effect of fracture aperture variations on the dispersion of contaminants. **Water Resources Research**, v.35, n.1, p.55- 63. 1999.
- KETCHAM, R. A.; CARLSON, W. D. Acquisition, optimization and interpretation of x-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. **Computers Geosciences**, v. 27 n. 4, p. 381-400, 2001.
- KETCHAM, R. A.; SLOTTKE, D. T.; SHARP, J. M. Three-dimensional measurement of fractures in heterogeneous materials using high-resolution X-ray computed tomography. **Geosphere**, v. 6, n. 5, p. 499–514, 2010.
- KOLTERMANN, C.E.; GORELICK, S.M. Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. **Water Resources Research**, v.32, n.9, p.2617-2658, 1996.
- KRAEMER, S. R. Analytic element ground water modeling as a research program (1980 to 2006). **Ground Water**, v. 45, n. 4, p. 402–408, 2007.
- KUHLMAN, K. L.; NEUMAN, S. P. Laplace-transform analytic-element method for transient porous-media flow. **Journal of Engineering Mathematics**, v. 64, n. 2, p. 113–130, 2009.
- KYLE, J. R.; KETCHAM, R. A. Application of high resolution X-ray computed tomography to mineral deposit origin, evaluation, and processing. **Ore Geology Reviews**, v. 65, n. P4, p. 821–839, 2015.
- LE GRAND, P. Advanced curvilinear shapes for object centered modeling of groundwater flow with the analytic element method. 2003. Tese (Doutorado em Ciência da Terra e do Meio Ambiente), Escola Nacional de Minas de Saint-Etienne, Universidade Jean Monnet, Saint-Etienne, França.
- LEE, S. H.; TCHELEPI, H. A.; JENNY, P.; DECHANT, L. J. Implementation of a Flux-Continuous

- Finite-Difference Method for Stratigraphic, Hexahedron Grids. **SPE Journal**, v. 7, n. 03, p. 267–277, 2007.
- LI, L.; SRINIVASAN, S.; ZHOU, H.; GOMEZ-HERNANDEZ, J.J. Two-point or multiple-point statistics? A comparison between the ensemble Kalman filtering and the ensemble pattern matching inverse methods. **Advances in Water Resources**, v. 86, p. 297–310, 2015.
- LI, L.; ZHOU, H.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. STEADY-state saturated groundwater flow modeling with full tensor conductivities using finite differences. **Computers & geosciences**, v. 36(10), p. 1211–1223, 2010.
- LINDE, N.; LOCHBÜHLER, T.; DOGAN, M.; VAN DAM, R. L. Tomogram-based comparison of geostatistical models: Application to the Macrodispersion Experiment (MADE) site. **Journal of Hydrology**, v. 531, p. 543–556, 2015.
- LUCAS, M.; CANTAREIRA, G. D.; WENDLAND, E. Solute transport performance analysis of equivalent apertures in a single undisturbed basaltic fracture. **Hydrogeology Journal**, v. 27(6), p. 1999–2010, 2019.
- LUCAS, M. C. **Migração de solutos em basalto fraturado: Quantificação experimental em laboratório e validação matemática**. 2016, 132 f. Tese (Doutorado em Ciências da Engenharia Ambiental) Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.
- LY, S.; CHARLES, C.; DEGRÉ, A. Geostatistical interpolation of daily rainfall at catchment scale: The use of several variogram models in the Ourthe and Ambleve catchments, Belgium. **Hydrology and Earth System Sciences**, v. 15, n. 7, p. 2259–2274, 2011.
- MACCORMACK, R. W.; CANDLER, G. V. The solution of the Navier-Stokes equations using Gauss-Seidel line relaxation. **Computers and Fluids**, v. 17, n. 1, p. 135–150, 1989.
- MAJUMDER, P.; ELDHO, T. I. A New Groundwater Management Model by Coupling Analytic Element Method and Reverse Particle Tracking with Cat Swarm Optimization. **Water Resources Management**, v. 30, n. 6, p. 1953–1972, 2016.
- MAJUMDER, P.; ELDHO, T. I. Vectorized simulation of groundwater flow and contaminant transport using analytic element method and random walk particle tracking. **Hydrological Processes**, v. 31(5), p. 1144–1160, 2017.
- MALONE, B. P.; JHA, S. K.; MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. B. Comparing regression-based digital soil mapping and multiple-point geostatistics for the spatial extrapolation of soil data. **Geoderma**, v. 262, p. 243–253, 2016.
- MARIÉTHOZ, G. **Geological stochastic imaging for aquifer characterization**. 2009, 249 p. Doctoral dissertation, Université de Neuchâte).
- MARIETHOZ, G.; CAERS, J. Multiple-point geostatistics: stochastic modeling with training images. **John Wiley & Sons**, 2014.
- MARIETHOZ, G.; MCCABE, M. F.; RENARD, P. Spatiotemporal reconstruction of gaps in multivariate fields using the direct sampling approach. **Water Resources Research**, v. 48, n. 10, p. 1–13, 2012.
- MARIETHOZ, G.; RENARD, P.; STRAUBHAAR, J. The direct sampling method to perform multiple-point geostatistical simulations. **Water Resources Research**, v. 46, n. 11, 2010.
- MARIN, I. S. P. **Aperfeiçoamento do método de elementos analíticos para simulação de escoamento em rochas porosas fraturadas**. 2011, 156 f. Tese (Doutorado em Ciências da Engenharia Ambiental) Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.
- MATOTT, L. S.; RABIDEAU, A. J.; CRAIG, J. R. Pump-and-treat optimization using analytic element method flow models. **Advances in Water Resources**, v. 29, n. 5, p. 760–775, 2006.
- MEERSCHMAN, E.; VAN MEIRVENNE, M.; VAN DE VIJVER, E.; *et al.* Mapping complex soil patterns with multiple-point geostatistics. **European Journal of Soil Science**, v. 64, n. 2, p. 183–191,

2013.

MEERSCHMAN, E.; PIROT, G.; MARIETHOZ, G.; STRAUBHAAR, J.; VAN MEIRVENNE, M.; RENARD, P. A practical guide to performing multiple-point statistical simulations with the Direct Sampling algorithm. **Computers and Geosciences**, v. 52, p. 307–324, 2013.

MONTEMAGNO, C.D.; PYRAK-NOLTE, L.J. 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. 1999.

MORALES RODRIGUEZ, K. X. **Avaliação de diferentes medidas de similaridade no SIMDISPAT-Novo Algoritmo de Simulação de Múltiplos Pontos**. 2021, 107 f. Dissertação (Mestre em Geociências) Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil.

MUSTAPHA, H.; DIMITRAKOPOULOS, R.. HOSIM: A high-order stochastic simulation algorithm for generating three-dimensional complex geological patterns. **Computers and Geosciences**, v. 37, n. 9, p. 1242–1253, 2011.

NEUMAN, S. P. Stochastic Continuum Representation of Fractured Rock Permeability as an Alternative to the REV and Fracture Network Concepts. **Groundwater Flow and Quality Modelling**, p. 331–362, 2012.

NEUMAN, S. P. Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks. **Hydrogeology Journal**, v. 13, n. 1, p. 124–147, 2005.

NOIRIEL, C.; GOUZE, P.; MADÉ, B. 3D analysis of geometry and flow changes in a limestone fracture during dissolution. **Journal of Hydrology**, v. 486, p. 211–223, 2013.

NOWAMOOZ, A.; RADILLA, G.; FOURAR, M.; BERKOWITZ, B. Non-fickian transport in transparent replicas of rough-walled rock fractures. **Transport in Porous Media**, v. 98, n. 3, p. 651-682, 2013.

NUSSBAUMER, R.; MARIETHOZ, G.; GLOAGUEN, E.; HOLLIGER, K. Hydrogeophysical data integration through Bayesian Sequential Simulation with log-linear pooling. **Geophysical Journal International**, v. 221(3), p. 2184-2200, 2020.

ORON, A. P.; BERKOWITZ, B. Flow in rock fractures: The local cubic law assumption reexamined. **Water Resources Research**, v. 34, n. 11, p. 2811–2825, 1998.

PAINTER, S.; CVETKOVIC, V.; MANCILLAS, J.; PENSADO, O. Time domain particle tracking methods for simulating transport with retention and first-order transformation. **Water Resour. Res.**, v. 44 (1), p. 1–11, 2008.

PARDO-IGÚZQUIZA, E.; DOWD, P. A. CONNEC3D: a computer program for connectivity analysis of 3D random set models. **Computers & geosciences**, v. 29(6), p. 775-785, 2003.

PATEL, H. M.; ELDHO, T. I.; RASTOGI, A. K. Simulation of Radial Collector Well in Shallow Alluvial Riverbed Aquifer Using Analytic Element Method. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, v. 136, n. 2, p. 107–119, 2010.

PEREIRA, M. J.; SOARES, A. Geostatistics for Environmental Applications. **Mathematical Geosciences**, v. 50, n. 2, p. 123–125, 2018.

POLAK, A.; ELSWORTH, D.; LIU, J.; GRADER, A.S. Spontaneous switching of permeability changes in a limestone fracture with net dissolution. **Water Resources Research**, v.40, n.W03502. 2004.

REIS, A. **Desenvolvimento da Ferramenta Computacional Fratcond, para Modelagem de Aquíferos Fraturados, utilizando Redes de Fraturas Discretas e Conduitos Equivalentes**. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil.

REZAEI, H.; MARIETHOZ, G.; KONESHLOO, M.; ASGHARI, O. Multiple-point geostatistical simulation using the bunch-pasting direct sampling method. **Computers and Geosciences**, v. 54,

p. 293–308, 2013.

RODRIGUES, D. B. B.; GUPTA, H. V.; SERRAT-CAPDEVILA, A.; OLIVEIRA, P. T. S.; MENDIONDO, E. M.; MADDOCK III, T.; MAHMOUD, M. Contrasting American and Brazilian Systems for Water Allocation and Transfers. **Journal of Water Resources Planning and Management**, v. 141, p. 04014087-1-04014087-11, 2014.

Rodriguez, A.; Calderwood, A.; Gooch, B. T.; Kniffin, M.; Foglia, L. Determining initial viability of local scale managed aquifer recharge projects in alluvial deposition systems. **Acque Sotterranee-Italian Journal of Groundwater**, v. 10(2), p. 7-18, 2021.

SAHIMI, M.; TAHMASEBI, P. Enhancing multiple-point geostatistical modeling: 1. Graph theory and pattern adjustment. **Journal of the American Water Resources Association**, v. 5, n. 3, p. 2–2, 2016.

SCHMITTBUHL, J.; STEYER, A.; JOUNIAUX, L.; TOUSSAINT, R. Fracture morphology and viscous transport. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, v. 45, n. 3, p. 422–430, 2008.

STIEN, M.; KOLBJØRNSEN, O. Facies Modeling Using a Markov Mesh Model Specification. **Mathematical Geosciences**, v. 43, n. 6, p. 611–624, 2011.

STRACK, O.D.L. 1989. **Groundwater Mechanics**. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall. Out of print: Contact Strack Consulting Inc.

STRACK, O. D. L. Principles of the analytic element method. **Journal of Hydrology**, v. 226, n. 3–4, p. 128–138, 1999.

STRACK, O. D. L. Theory and applications of the Analytic Element Method. **Reviews of Geophysics**, v. 41, n. 2, 2003.

STRACK, O. D. L. **Complex Variable Methods**. In **Analytical Groundwater Mechanics**. Cambridge: Cambridge University Press, p. 218-356, 2017.

STRAUBHAAR, J.; RENARD, P.; MARIETHOZ, G.; FROIDEVAUX, R.; BESSON, O. An improved parallel multiple-point algorithm using a list approach. **Mathematical Geosciences**, v. 43, n. 3, p. 305–328, 2011.

STREBELLE, S. Conditional simulation of complex geological structures using multiple-point statistics. **Mathematical geology**, v. 34, n. 1, p. 1–21, 2002.

STREBELLE, S.; CAVELIUS, C. Solving speed and memory issues in multiple-point statistics simulation program SNESIM. **Mathematical Geosciences**, v. 46, n. 2, p. 171–186, 2014.

SZULCZEWSKI, M. L.; MACMINN, C. W.; HERZOG, H.J.; JUANES, R. 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, 2012.

TAHMASEBI, P. HYPPS: A hybrid geostatistical modeling algorithm for subsurface modeling. **Water Resources Research**, v. 53, n. 7, p. 5980–5997, 2017.

TAHMASEBI, P.; HEZARKHANI, A.; SAHIMI, M. Multiple-point geostatistical modeling based on the cross-correlation functions. **Computational Geosciences**, v. 16, n. 3, p. 779–797, 2012.

TAHMASEBI, P.; SAHIMI, M.; CAERS, J. MS-CCSIM: Accelerating pattern-based geostatistical simulation of categorical variables using a multi-scale search in fourier space. **Computers and Geosciences**, v. 67, p. 75–88, 2014.

TAKAFUJI, E. H. M.; ROCHA, M. M.; RAMOS, G. Z. Estudo comparativo dos métodos de simulação Snesim e Filtersim - Aplicado a um modelo sintético de cobre. **Boletim Paranaense de Geociências**, v. 74, n. 1, p. 37–46, 2018.

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

TODSEN, M. On the solution of transient free-surface flow problems in porous media by finite-

- difference methods. **Journal of Hydrology**, v. 12, p. 177–210, 1971.
- TREFRY, M. G.; MUFFELS, C. FEFLOW: A finite-element ground water flow and transport modeling tool. **Ground Water**, v. 45, n. 5, p. 525–528, 2007.
- TSANG Y. W.; TSANG, C. F. Channel model of flow through fractured media. **Water Resources Research**, v. 23, n. 3, p. 467-479, 1987.
- VENKATESHAN, S.P.; SWAMINATHAN, P. **Computational methods in engineering**. Waltham, Academic Press. 672p, 2014.
- WANG, H. F.; ANDERSON, M. P. **Introduction to groundwater modeling: finite difference and finite element methods**. Academic Press, p. p.2, 1995.
- WATANABE, N.; ISHIBASHI, T.; OHSAKI, Y.; TSUCHIYA, Y.; TAMAGAWA, T.; HIRANO, N.; OKABE, H.; TSUCHIYA, N. 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. 2011.
- WEATHERILL, D.; GRAF, T.; SIMMONS, C. T.; THERRIEN, R.; REYNOLDS, D. A. Discretizing the fracture-matrix interface to simulate solute transport. **Ground Water**, v. 46, n. 4, p. 606–615, 2008.
- WEN, X.H.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J.J. Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media - A comparison of multi-Gaussian and non-multi-Gaussian models. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 30, n. 1-2, p. 129-56, 1998.
- WENDLAND, E.; HIMMELSBACH, T. 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, 2002.
- YIN, G.; MARIETHOZ, G.; MCCABE, M. F. Gap-filling of landsat 7 imagery using the direct sampling method. **Remote Sensing**, v. 9, n. 1, p. 1–20, 2017.
- YOUNG, D. S. Indicator kriging for unit vectors: Rock joint orientations. **Mathematical Geology**, v. 19, n. 6, p. 481–501, 1987.
- ZHANG, T.; SWITZER, P.; JOURNEL, A. Filter-based classification of training image patterns for spatial simulation. **Mathematical Geology**, v. 38, n. 1, p. 63–80, 2006.
- ZHU, W.C.; LIU, J.; ELSWORTH, D.; POLAK, A.; GRADER, A.; SHEN, J.C.; LIU, J.X. 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. 2007.
- ZIEGEL, E.; BEYER, W. H. **Handbook of Mathematical Sciences**. 2006.
- ZIMMERMAN, R. W.; YEO, I. W. Fluid flow in rock fractures: From the Navier-Stokes equations to the cubic law. **Geophysical Monograph-American Geophysical Union**, v. 122, p. 213-224, 2000.

8. ANEXOS

ANEXO I - ALGORITMO CONNEC2D

A análise de conectividade envolve a estimativa da função de conectividade $\tau(h)$ para diferentes direções espaciais (PARDO-IGÚZQUIZA e DOWD, 2003). Dado um conjunto de dados G , todos os seus pontos pertencem a um subconjunto aleatório S ou ao seu conjunto complementar S_c :

$$G = S \cup S_c \quad (I.1)$$

Considerando, por exemplo, S como a fase permeável (ou valor de abertura avaliado) e S_c é a fase impermeável (ou a união de várias fases ou categorias). Assim, os pontos pertencentes de S e S_c são codificados usando uma função indicadora $I(u)$ assumindo valores de 1 e 0:

$$I(u) = \begin{cases} 1 & \text{se } u \in S \\ 0 & \text{se } u \in S_c \end{cases} \quad (I.2)$$

Na qual u é um ponto arbitrário de G . Dois pontos, u e u' , de S são conectados, denotados por $u \leftrightarrow u'$, se existe uma sequência em S de pontos vizinhos entre u e u' . Um subconjunto $C \subset S$ está conectado se $u \leftrightarrow u'$, $\forall u; u' \in C$. Os pontos conectados são os maiores subconjuntos conectados de S . A função de conectividade $\tau(h)$ é definida como a probabilidade de que dois pontos pertencentes a S estejam conectados:

$$\tau(h) = P(u \leftrightarrow u + h | u, u + h \in S) \quad (I.3)$$

Na qual: $\tau(0) = 1$ e $\tau(h)$ é uma função decrescente à medida que h aumenta. A função de conectividade é estimada por:

$$\tau(h) = \frac{N(u \leftrightarrow u + h | u, u + h \in S)}{N(u, u + h \in S)} \quad (I.4)$$

Em que: $\tau(h)$ é a estimativa da função de conectividade para a distância h , $N(u \leftrightarrow u + h | u, u + h \in S)$ o número de pontos separados por uma distância h que pertencem à fase S e estão conectados e $N(u, u + h \in S)$ o número de pontos, separados por uma distância h que pertencem à fase S e que podem ou não estar conectados. Cada ponto conectado de S recebe uma numeração em série 1, 2, 3, 4... n e todos os pontos que não pertencem a S recebem um índice 0. Ao comparar dois blocos separados por uma distância h , existem três possibilidades:

- No caso de um ou ambos os pontos terem índice 0, o par não contribui para $N(u \leftrightarrow u + h | u, u + h \in S)$ ou para $N(u, u + h \in S)$;

- Ambos os índices diferem de 0, mas não têm o mesmo valor. Este par aumenta $N(u, u + h \in S)$ por 1 porque o par de pontos pertencem a S ;
- Ambos os índices são iguais e diferem de 0. Isso incrementa os valores de $N(u, u + h \in S)$ e $N(u \leftrightarrow u + h \mid u, u + h \in S)$ em 1, pois ambos os pontos pertencem a S e estão conectados.

A descrição completa do algoritmo pode ser consultada em Pardo-Igúzquiza e Dowd (2003).

ANEXO II - LEI CÚBICA

A Lei Cúbica é resultante de simplificações realizadas a partir das equações de Navier-Stokes:

$$\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla h \rho g \quad (\text{II. 1})$$

Na qual: ρ (M.L^{-3}) é a massa específica do fluido; \mathbf{v} (L.T^{-1}) é o vetor velocidade de escoamento do fluido; g (L.T^{-2}) é a aceleração da gravidade; η é a viscosidade dinâmica do fluido (F.T.L^{-2}). Para o escoamento tridimensional, a Equação II.1 é escrita na seguinte forma:

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

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

$$\begin{aligned} \left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) &\gg \text{mag} \left(\rho v_x \cdot \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho v_y \cdot \frac{\partial v_x}{\partial y} + \rho v_z \cdot \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\ \left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) &\gg \text{mag} \left(\rho v_x \cdot \frac{\partial v_y}{\partial x} + \rho v_y \cdot \frac{\partial v_y}{\partial y} + \rho v_z \cdot \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \\ \left(\eta \cdot \frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2}, \eta \cdot \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) &\gg \text{mag} \left(\rho v_x \cdot \frac{\partial v_z}{\partial x} + \rho v_y \cdot \frac{\partial v_z}{\partial y} + \rho v_z \cdot \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (\text{II. 3})$$

As equações de Navier-Stokes podem ser linearizadas para as chamadas equações de Stokes:

$$\begin{aligned} \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) &= \rho g \frac{\partial h}{\partial x} \\ \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) &= \rho g \frac{\partial h}{\partial y} \\ \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) &= \rho g \frac{\partial h}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{II. 4})$$

Assumindo v_z na direção z seja insignificante, e que v_x e v_y na direção z dominem as outras forças viscosas, as equações de Stokes simplificadas podem ser escritas como:

$$\begin{aligned}\eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) &= \rho g \frac{\partial h}{\partial x} \\ \eta \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) &= \rho g \frac{\partial h}{\partial y}\end{aligned}\quad (\text{II. 5})$$

Integrando em relação a z e considerando válida a condição de não deslizamento nas paredes da fratura definidas em $z = a_1$ e $z = -a_2$ (LUCAS, 2016):

$$\begin{aligned}v_x(x, y, z) &= \frac{\rho g}{2\eta} \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \cdot (z - a_1) \cdot (z + a_2) \\ v_y(x, y, z) &= \frac{\rho g}{2\eta} \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \cdot (z - a_1) \cdot (z + a_2)\end{aligned}\quad (\text{II. 6})$$

As Equações II.6 descrevem o perfil parabólico de velocidades para o caso de uma abertura constante (modelo das Placas Planas Paralelas) ao longo de todo o comprimento da fratura, sendo paralelas ao gradiente de pressão local. Realizando a integração da Equação II.6 sobre a direção z e aplicando-se a equação da continuidade ao escoamento local obtém-se a Equação II.7, com a forma da equação de Reynolds:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho g a^3(x)}{12\eta} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho g a^3(y)}{12\eta} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (\text{II. 7})$$

$$\text{div} \left(\frac{\rho g a^3(x, y)}{12\eta} \nabla h \right) = 0 \quad (\text{II. 8})$$

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

$$Q = -\frac{\rho g}{\eta} \cdot \frac{a^3}{12} H \cdot \nabla h \quad (\text{II. 9})$$

A Equação II.9 é a solução simplificada do escoamento macroscópico entre placas planas paralelas. Em um meio homogêneo e isotrópico, a descarga específica ($L \cdot T^{-1}$), é expressa pela equação de Darcy:

$$q = \frac{Q}{bH} \quad (\text{II. 10})$$

$$q = -\frac{\rho g}{\eta} \cdot \frac{a^2}{12} \cdot \nabla h \quad (\text{II. 11})$$

Na qual, relacionando com as Equações 5 e 6, obtêm-se a condutividade hidráulica pela Equação II.12:

$$K = \frac{\rho g}{\eta} \cdot \frac{a^2}{12} \quad (\text{II. 12})$$

ANEXO III – ALGORITMO CTRW (Continuous-Time Random Walk Particle Tracking)

O algoritmo de *particle tracking* utilizado (*Continuous Time Random Walk - CTRW*) é detalhado em Hansen e Berkowitz (2020a), sendo apresentado a seguir a teoria resumida. No CTRW, cada partícula é representada por uma localização espacial e um tempo, ambos atualizados de modo iterativo. Na iteração n , a posição x_n e o tempo t_n são atualizados de acordo com as Equações III.1 e III.2:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{v(x_n)}{\|v(x_n)\|} d + \Delta_{x,n} \quad (\text{III. 1})$$

$$t_{n+1} = t_n + \Delta_{t,n} \quad (\text{III. 2})$$

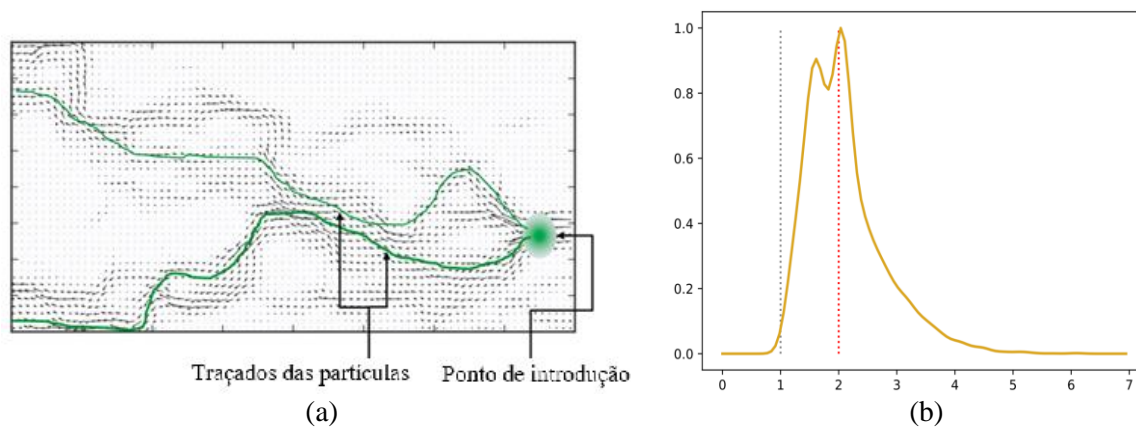
$$\Delta_{t0,n} = \frac{d}{\|v(x_n)\|} \quad (\text{III. 3})$$

Nas quais: x_n é atualizado viajando d unidades ao longo da linha de fluxo local e, em seguida, fazendo um salto aleatório $\Delta_{x,n}$ no plano ortogonal ao vetor de velocidade local $v(x_n)$. Cada um destes componentes é extraído de $N(0, 2\alpha_t d)$, onde α_t é a dispersividade transversal do meio. O incremento de tempo, $\Delta_{t,n}$, é especificado através de duas funções e um parâmetro: $f(r)$: uma função de densidade de probabilidade (FDP) representando a variação $\Delta_{t',n}$ (tempo necessário para a advecção de x_n para $x_n + 1$, contabilizando toda a heterogeneidade) para $d/\|v(x_n)\|$. O tempo de advecção $\Delta_{t',n}$ é calculado de um traçado aleatório obtido de $f(r)$, multiplicado por $\Delta_{t0,n}$. Dentre as distribuições para $f(r)$ está a Gaussiana inversa (ou seja, comportamento ADE); $g(t)$: uma FDP representando a quantidade de tempo que uma determinada partícula permanece imobilizada durante um dado evento de imobilização; λ : a probabilidade de imobilização de qualquer partícula dada por unidade de tempo.

O número de eventos de imobilização n no tempo de advecção $\Delta_{t',n}$ é calculado de forma aleatória a partir da distribuição de Poisson ($\cdot; \lambda\Delta_{t',n}$). Para cada etapa de cada partícula, n extrações de $g(t)$ são executadas, somadas e então adicionadas para chegar a $\Delta_{t,n}$. Uma vez concluída a etapa, um movimento aleatório representando a dispersão Fickiana α_t em escala local é adicionado em um plano ortogonal a $v(x_n)$.

A Figura IIIa ilustra a influência dos vetores de velocidade no caminho percorrido por uma partícula. A Figura IIIb mostra os resultados gerados pelo CTRW em termos de curvas de passagem com concentrações relativas.

Figura III. Em (a) o caminho percorrido por diferentes partículas em um campo de velocidades a partir de um ponto de introdução e (b) uma curva de passagem em concentrações relativas pelo CTRW.



Fonte: Hansen e Berkowitz (2020)b.



EESC • USP