

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE INFORMÁTICA  
CURSO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

GUSTAVO JANDT FELLER

## **Visualização de Resultados de Simulação de Processos Diagenéticos**

Monografia apresentada como requisito parcial para a obtenção do grau de Bacharel em Ciência da Computação.

Orientadora: Profa. Dra. Carla M. D. S. Freitas  
Co-orientador: Marcos Antônio Klunk

Porto Alegre, Dezembro de 2014

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor: Prof. Carlos Alexandre Netto

Vice-Reitor: Prof. Rui Vicente Oppermann

Pró-Reitor de Graduação: Prof. Sérgio Roberto Kieling Franco

Diretor do Instituto de Informática: Prof. Luís da Cunha Lamb

Coordenador do Curso de Ciência da Computação: Prof. Raul Fernando Weber

Bibliotecária-Chefe do Instituto de Informática: Beatriz Regina Bastos Haro

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente, agradeço a Deus por recompensar todo o meu esforço.

Agradeço à minha família por toda a base ética, psicológica e financeira necessários para que eu apresente este trabalho.

Agradeço aos meus amigos por todos os momentos que me ajudaram a esquecer as aflições da vida acadêmica.

Agradeço aos meus colegas de curso por me ajudarem sempre quando precisei.

Agradeço aos meus orientadores, Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Carla Maria Dal Sasso Freitas e Marcos Antônio Klunk, por, mesmo sendo muito ocupados, sempre tentaram dispender um tempo para me ajudar a realizar este trabalho. Além deles, também quero agradecer a todos os professores e colegas do projeto de Modelagem Diagenética por toda a ajuda.

Agradeço a UFRGS e ao Instituto de Informática pela excelente infraestrutura e pelo ensino de alta qualidade oferecidos.

E agradeço à PETROBRAS e ao PRH PB-217 por toda a ajuda e investimento em meu trabalho.

## RESUMO

Diagênese é definida como o conjunto de mudanças químicas, físicas e biológicas pelas quais passam os sedimentos de rochas, desde a sua deposição, durante e após a sua litificação e antes das condições de metamorfismo. Os processos diagenéticos são controlados por fatores como temperatura, pressão, minerais, atividade dos íons dissolvidos na água e de sistemas orgânicos. Esses processos correspondem à formação das rochas atuais e ocorreram ao longo de milhões de anos.

A modelagem geoquímica de processos diagenéticos baseia-se na utilização das propriedades químicas dos minerais e de suas interações com fluidos de diferentes composições e regimes de fluxo para simular as reações diagenéticas e definir os parâmetros físico-químicos e físicos (com pH, temperatura, salinidade das soluções, porosidade) e os ambientes em que tais reações ocorreram. Tais simulações geram conjuntos de dados relativamente complexos, mas volumosos, já que correspondem à modelagem dos processos de formação das rochas reservatório ao longo de milhões de anos. Os dados gerados permitem avaliar a composição das rochas e seus parâmetros geoquímicos, tais como porosidade, permeabilidade, tortuosidade, etc.

O presente trabalho de graduação tem como objetivo desenvolver técnicas de visualização desses resultados que permitam aos geólogos a avaliação da modelagem do ponto de vista de fidelidade em relação a eventuais amostras geológicas coletadas dos reservatórios atuais. Utilizamos dados de um modelo hipotético resultantes de simulações realizadas utilizando um software desenvolvido no contexto de um projeto em andamento no Instituto de Informática. O visualizador é parte integrante do software e foi desenvolvido com base em gráficos 2D e 3D, com acompanhamento e intervenção de especialistas em geologia e geoquímica.

**Palavras-chave:** Visualização de dados. Diagênese. Modelagem geoquímica.

## **Visualization of Diagenetic Processes Simulation Results**

### **ABSTRACT**

Diagenesis is defined as the set of chemical, physical and biological changes through which pass the rocks sediments since its deposition, during and after lithification and before the metamorphic conditions. The diagenetic processes are controlled by factors such as temperature, pressure, minerals, activity of the ions dissolved in water and organic systems. These processes correspond to the formation of the current rocks and they occurred over millions of years.

Geochemical modeling of diagenetic processes are based on the use of chemical properties of minerals and their interactions with fluids of different compositions and flow rate to simulate diagenetic reactions and define physical chemical and physical (such as pH, temperature, salinity solutions, porosity) and the environments in which these reactions occur. Such simulations generate sets of relatively complex data, but voluminous, as it corresponds to modeling the processes of formation of reservoir rocks over millions of years. The data generated to evaluate the composition of the rocks and their geochemical parameters such as porosity, permeability, tortuosity, etc.

This work aims to develop visualization techniques of these results that allow geologists to evaluate the modeling loyalty point of view in relation to possible geological samples collected from present reservoirs. We use data from a hypothetical model resulting from simulations using a software developed in the context of an ongoing project in the Instituto de Informática. The visualizer is part of the software and was developed based on 2D and 3D graphics, with monitoring and intervention of geology and geochemistry experts.

**Keywords:** Data visualization. Diagenesis. Geochemical modeling.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Divisão das etapas da diagênese em regiões, adaptado de Mazzulo (2004).....	13
Figura 2.2 – Fluxograma das etapas de um processo de simulação .....	16
Figura 3.1 – Gráfico feito depois de rodar uma simulação exemplo no PhreeqI .....	18
Figura 3.2 – Alguns exemplos de gráficos disponíveis para o GWB .....	19
Figura 3.3 – Exemplos de gráficos disponíveis pelo PetraSim.....	20
Figura 4.1 – Exemplo de um arquivo de cabeçalho .....	23
Figura 4.2 – À esquerda, um exemplo de arquivo de dados de uma simulação em modo “Batch” e à direita um exemplo de arquivo de dados de uma simulação em 1D .....	24
Figura 4.3 – Tela da interface gráfica, o retângulo vermelho representa a opção, em menu, para selecionar os resultados da simulação no disco, e o retângulo azul representa a lista de simulações, dispostas em uma Combo Box .....	25
Figura 4.4 – Tela da interface gráfica mostrando, à esquerda a opção pensando em analisar uma espécie, e à direita pensando em analisar uma variável.....	26
Figura 4.5 – Tela da interface gráfica mostrando a seleção dos eixos, onde no mínimo tem que ser selecionados dois eixos.....	28
Figura 4.6 – Tela da interface gráfica, utilizando um exemplo de simulação em 2D, mostrando a necessidade do usuário selecionar a célula (podendo selecionar também o tempo, que não é o caso desse exemplo) que o usuário quer visualizar os resultados .....	29
Figura 4.7 – Tela da interface gráfica e da janela de opções avançadas, mostrando o que o usuário pode editar para visualizar .....	30
Figura 4.8 – Demonstração do gráfico criado após cumprir todos os passos.....	31
Figura 4.9 – Gráfico de linha da fração de volume de quartzo.....	32
Figura 4.10 – Gráfico de linha com dois eixos, comparando fração de volume de quartzo com seu índice de saturação .....	32
Figura 4.11 – Gráfico de pontos comparando a concentração de Ca++ com a fração de volume da Calcita.....	33
Figura 4.12 – Gráfico de superfície de uma simulação 1D visualizando a fração de volume de Quartzo em relação ao tempo e a distância .....	34
Figura 4.13 – Gráfico 3D sendo animado .....	35
Figura 4.14 – Gráfico de linha 2D sendo animado .....	35
Figura 5.1 – Gráfico da temperatura da simulação batch, mostrando que a temperatura, durante a simulação, permaneceu constante .....	37
Figura 5.2 – Gráfico da porosidade da simulação batch, mostrando que a porosidade diminuiu, mas em uma escala muito pequena .....	38
Figura 5.3 – Gráfico da taxa de mudança de porosidade da simulação batch .....	39
Figura 5.4 – Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação batch .....	40
Figura 5.5 – Gráfico da fração de volume de todos os minerais presentes na simulação batch .....	41
Figura 5.6 – Gráfico da fração de volume de alguns minerais presentes na simulação batch, mostrando que há variação de fração de volume, mas em uma escala muito pequena .....	41
Figura 5.7 – Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação 1D em relação ao tempo .....	42
Figura 5.8 – Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação 1D em relação à distância .....	43
Figura 5.9 – Gráfico 3D do índice de saturação do quartzo em relação ao tempo e à distância na simulação 1D.....	44
Figura 5.10 – Gráfico 3D da velocidade de fluxo da água em relação ao tempo e à distância na simulação 1D.....	44

Figura 5.11 – Gráfico 3D da permeabilidade do domínio de simulação em relação ao tempo e à distância, nesse caso, a permeabilidade está em zero.....	45
Figura 5.12 – Gráfico da fração de volume da dolomita em relação à distância em um dos sentidos em um certo tempo de simulação e em uma coluna de células .....	46
Figura 5.13 – Gráficos de fração de volume da dolomita em dois tempos de simulação em relação à distância em um dos sentidos, mostrando o uso da animação.....	47
Figura 5.14 – Gráfico 3D da fração de volume de dolomita em relação à distância nos dois sentidos em um tempo de simulação.....	48
Figura 5.15 – Gráficos 3D da fração de volume de dolomita em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação.....	49
Figura 5.16 – Gráficos 3D da densidade do volume total do domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação .....	50
Figura 5.17 – Gráficos 3D da permeabilidade do domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação.....	51
Figura 5.18 – Gráficos 3D da velocidade de fluxo em cada sentido no domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação .....	52

## **LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS**

1D	Uma dimensão
2D	Duas dimensões
GWB	The Geochemist's Workbench



## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	<b>10</b>
<b>1.1 Motivação</b> .....	<b>10</b>
<b>1.2 Objetivo do Trabalho</b> .....	<b>11</b>
<b>1.3 Organização do Texto</b> .....	<b>11</b>
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO</b> .....	<b>12</b>
<b>2.1 Diagênese</b> .....	<b>12</b>
<b>2.2 Modelagem Geoquímica</b> .....	<b>13</b>
<b>2.3 Modelos de Atividade</b> .....	<b>14</b>
<b>2.4 Índice de Saturação</b> .....	<b>14</b>
<b>2.5 Processo de Simulação</b> .....	<b>15</b>
<b>3 ESTADO DA ARTE</b> .....	<b>17</b>
<b>3.1 PhreeqcI</b> .....	<b>17</b>
<b>3.2 GWB</b> .....	<b>18</b>
<b>3.3 PetraSim</b> .....	<b>19</b>
<b>4 VISUALIZAÇÃO DE DADOS</b> .....	<b>21</b>
<b>4.1 Organização e Descrição dos Dados</b> .....	<b>21</b>
<b>4.2 Técnicas de Visualização</b> .....	<b>25</b>
4.2.1 Interface para configuração das visualizações.....	25
4.2.2 Técnicas de Visualização .....	31
<b>5 ESTUDOS DE CASOS</b> .....	<b>36</b>
<b>5.1 Simulação Batch</b> .....	<b>37</b>
<b>5.2 Simulação 1D</b> .....	<b>42</b>
<b>5.3 Simulação 2D</b> .....	<b>46</b>
<b>6 DISCUSSÃO E CONCLUSÕES</b> .....	<b>54</b>
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>55</b>
<b>GLOSSÁRIO</b> .....	<b>57</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Há várias definições para a expressão “visualização de dados” no contexto da ciência da computação, mas a ideia comum a todas elas é que a visualização serve para o usuário obter um *insight* sobre dados sendo observados através de técnicas de computação gráfica. Outra ideia comum é a da “amplificação da cognição” que permitiria um entendimento mais rápido dos dados apresentados. Essas duas ideias estão presentes nas definições dadas por Card et al. (1999), quando diz que visualização é o uso de representações visuais interativas de dados baseados em computador que amplificam a cognição, e em Telea (2008) para quem o objetivo da visualização é adquirir *insight* por meio de gráficos interativos em vários aspectos relacionados a alguns processos que estamos interessados, como simulação científica ou alguns processos do mundo real.

Pela abrangência que tem, a definição que será utilizada no trabalho é que visualização é um estudo da transformação de dados para representações visuais a fim de facilitar processos cognitivos eficazes e eficientes na execução de tarefas que envolvem dados (Chen et al., 2013).

### 1.1 Motivação

Para qualificarmos a importância do presente trabalho, precisamos primeiro da definição de diagênese. Diagênese é definida como o conjunto de mudanças químicas, físicas e biológicas pelas quais passam os sedimentos de rochas, desde a sua deposição, durante e após a sua litificação e antes das condições de metamorfismo. Os processos diagenéticos são controlados pelos seguintes fatores: temperatura, pressão, minerais, atividade dos íons dissolvidos na água e de sistemas orgânicos (De Ros, 1996). O trabalho é importante pois propõe-se a ajudar na compreensão (i) dos processos que ocorreram durante milhões de anos, e (ii) dos fatores que podem influenciar a qualidade do petróleo na região simulada.

Atualmente, não existem simuladores comerciais específicos para simular processos diagenéticos. São utilizados softwares desenvolvidos para outros propósitos, como o PHREEQC<sup>1</sup>, o GWB<sup>2</sup>, e o TOUGHREACT<sup>3</sup>. Desses, só o GWB possui uma interface gráfica

---

<sup>1</sup> [http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC\\_coupled/phreeqc/](http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/)

<sup>2</sup> <http://www.gwb.com/>

<sup>3</sup> <http://esd.lbl.gov/research/projects/tough/software/toughreact.html>

nativa; os outros dois têm outros softwares que atuam como suas interfaces gráficas e, em geral, seus módulos de visualização são bem limitados para o contexto da diagênese. Na literatura, existem alguns poucos trabalhos que relatam simulação de processos diagenéticos, como Bourdreau (1996) e Park e Ortoleva (2003). Porém, nenhum dos dois apresenta qualquer visualização dos resultados de suas simulações.

## **1.2 Objetivo do Trabalho**

O objetivo do trabalho é desenvolver um conjunto técnicas de visualização, através da construção fácil de gráficos, para que os geólogos possam observar os resultados de suas simulações, as quais são executadas para testar hipóteses sobre como ocorreu a formação dos reservatórios de petróleo para determinar a qualidade do óleo existente.

## **1.3 Organização do Texto**

Esse trabalho está estruturado da seguinte maneira. No capítulo 2 será apresentada a fundamentação geológica e geoquímica necessária ao trabalho. O capítulo 3 abordará os softwares comerciais que oferecem visualização de resultados de simulações geoquímicas. O capítulo 4 tratará da organização dos dados empregados no trabalho e as técnicas de visualização utilizadas. O capítulo 5 trará um estudo de caso para verificar a utilidade das técnicas de visualização utilizadas. E o capítulo 6 são feitas as considerações finais e o que pode ser explorado no futuro sobre o assunto.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO

Essa seção tratará de assuntos necessários para a compreensão do trabalho. Na seção 2.1 será tratada mais a fundo a diagênese. A seção 2.2, uma introdução à modelagem geoquímica. Na seção 2.3 apresentamos uma breve explicação sobre os modelos de atividade. A seção 2.4 apresenta a definição de índice de saturação. E a seção 2.5 introduz o processo de simulação para explicar como são obtidos os dados de saída a serem visualizados.

### 2.1 Diagênese

Como definido na seção 1, diagênese é o conjunto de mudanças químicas, físicas e biológicas pelas quais passam os sedimentos de rochas, desde a sua deposição, durante e após a sua litificação e antes das condições de metamorfismo. Essas mudanças são controladas pelos seguintes fatores: temperatura, pressão, minerais, atividade dos íons dissolvidos na água e de sistemas orgânicos. A passagem da fase de diagênese para metamorfismo é difícil de se definir, porque, de acordo com Sujkowski (1958), esse limite não é preciso em termos de pressão e temperatura, e nem há uma fronteira nítida entre diagênese e intemperismo.

Diagênese compreende todos os processos que convertem o sedimento bruto em uma rocha sedimentária (Worden e Burley, 2003). É um processo ativo pelo qual o mineral sedimentário reage para recuperar equilíbrio em um ambiente cuja pressão, temperatura e química estão mudando. Essas reações podem aumentar, modificar ou destruir porosidade e permeabilidade.

Uma classificação muito popular entre os geólogos para classificação das etapas da diagênese é dividir em três etapas (Figura 2.1): Eodiagênese, Mesodiagênese e Telodiagênese. A Eodiagênese é o estágio da diagênese, em que seus processos deposicionais são significativamente afetados por sua proximidade da superfície, assim, as reações ocorrem em temperaturas e profundidades baixas. Mesodiagênese é o estágio que os sedimentos e rochas são soterrados para tais profundidades que não é mais dominado por processos diretamente relativos a superfície, sob condições de temperatura e profundidade mais elevadas. Por último, a Telodiagênese é o estágio que as rochas são afetadas por processos associados com soergimentos e erosão (Ali et al., 2010).

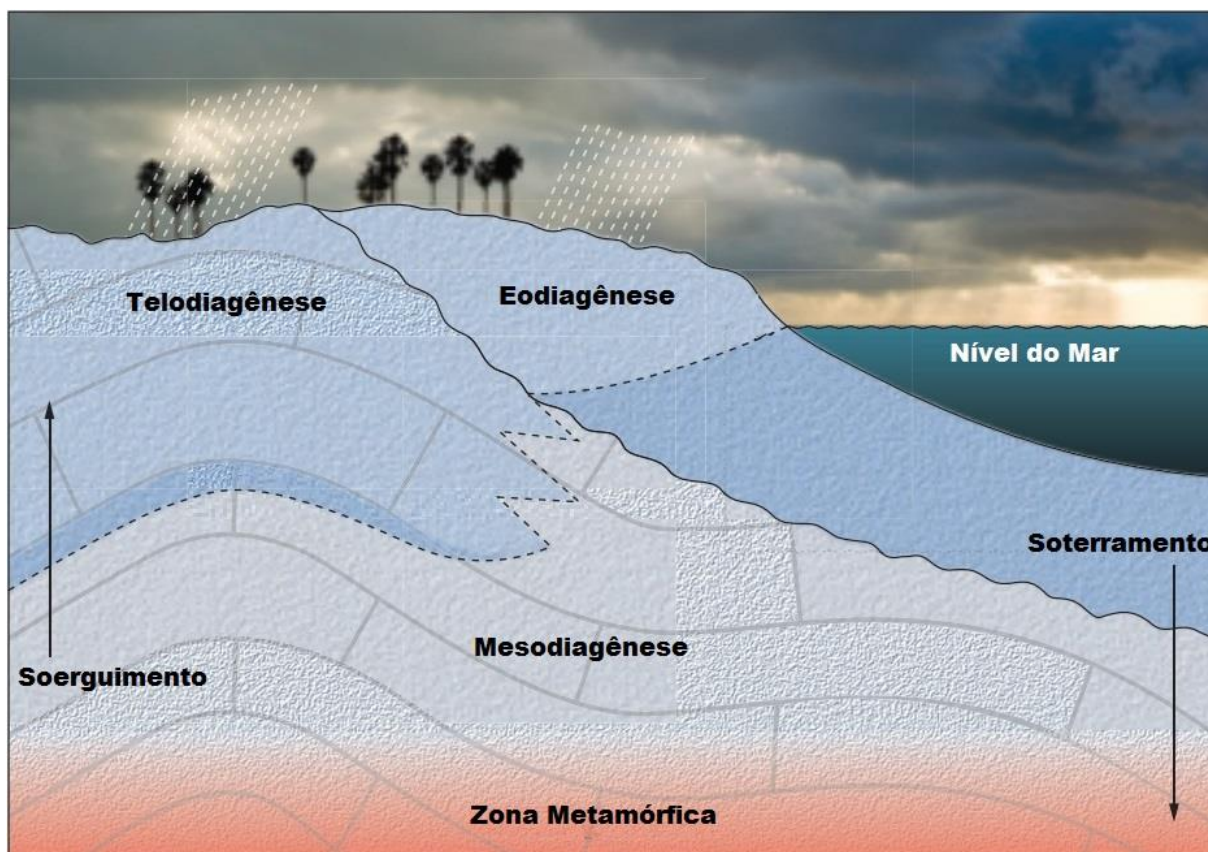


Figura 2.1: Divisão das etapas da diagênese em regiões, adaptado de Mazzulo (2004)

## 2.2 Modelagem Geoquímica

Um modelo geoquímico só é realmente útil como uma ferramenta de previsão se existe a possibilidade de validação dos resultados. Na realidade, este é um objetivo que na maioria das vezes se torna inatingível pela complexidade dos sistemas naturais, dados de campo insuficientes e as incertezas relativas à forma de como o sistema irá mudar ao longo do tempo. Um modelo deve ser tratado como uma simplificação da realidade e como uma ferramenta capaz de estimar a probabilidade de que uma previsão possa ser considerada verdadeira ou falsa (Nordstrom, 1994).

Os modelos geoquímicos são baseados no princípio de conservação de massa. Estes modelos podem ser classificados em duas categorias distintas: (1) *modelos que não consideram o processo de transporte* referindo-se apenas ao modelo de reação geoquímica ou simplesmente “batch models”. (2) *modelos que consideram os processos de transporte e reações geoquímicas* são chamados de modelos de transporte acoplado e de reações. Estes modelos geoquímicos são ferramentas que tem como objetivo caracterizar os processos

geoquímicos ocorrentes em um determinado ambiente. Esses modelos podem ser usados para uma grande variedade de propósitos, incluindo determinação de reações geoquímicas que predominam em um determinado sistema, a quantificação da extensão em que essas reações ocorrem, além de estimar as taxas de fluxo de água subterrânea (Parkhurst e Plummer, 1993).

Muitos softwares, que utilizam as reações geoquímicas, são baseados na conservação da concentração total dos componentes combinado com o equilíbrio químico. Equilíbrio químico pode ser calculado pela *energia livre de Gibbs* ou pela *equação da ação das massas* que envolvem equilíbrio constante. O método que utiliza a energia livre de Gibbs é considerado mais robusto, matematicamente, do que o método que utiliza as constantes de equilíbrio, embora esta (constante de equilíbrio) seja mais utilizada pelos geoquímicos.

### 2.3 Modelos de Atividade

A atividade, também conhecida como concentração efetiva ou real, corrige o efeito das interações entre íons de uma solução. A fórmula da atividade é representada pela equação:

$$a_x = [X] \cdot \gamma_x$$

onde  $a_x$  representa a atividade do íon X,  $[X]$  representa a concentração do íon X e  $\gamma_x$  representa o coeficiente de atividade do íon X.

O coeficiente de atividade é uma função da quantidade de material dissolvido em solução. Para o cálculo do precisamos da força iônica da solução.

Os compostos iônicos, quando dissolvidos na água, dissociam-se em íons. Por isso a força iônica é função da concentração de todos os íons presentes naquela solução.

### 2.4 Índice de Saturação

A determinação dos índices de saturação nos revela quais espécies minerais estão presentes no meio geológico.

Utiliza-se a seguinte fórmula para calcular o índice de saturação:

$$IS = \frac{Q}{Kps}$$

onde IS é o índice de saturação, Q representa o produto das atividades de todos os íons do soluto e Kps representa o produto de solubilidade do soluto (tabelado). Assim, temos as seguintes relações:

- $\log IS = 0$ , a solução está saturada;
- $\log IS > 0$ , a solução está supersaturada;
- $\log IS < 0$ , a solução está subsaturada.

Índices de saturação “zero” indicam que o mineral atingiu o estado estacionário com a água presente na formação geológica. Um índice de saturação negativo implica que os minerais estão subsaturados na fase aquosa. Nestas condições, os minerais estão dissolvidos. Para um índice de saturação positivo, onde os minerais estão supersaturados, temos a precipitação de fase mineral.

## 2.5 Processo de Simulação

Os processos de simulação geoquímica são divididos em três grandes etapas: entrada de dados, execução da simulação e saída de dados (Figura 2.2).

A entrada dos dados pode ser via *script* (mais comum) ou via interface gráfica, consistindo na coleta de informações referentes ao meio geológico de interesse, por meio de análises químicas realizadas em laboratórios e por dados estratigráficos da bacia sedimentar.

Dados como:

- a) concentração de solutos presentes na água;
- b) composição mineral da rocha;
- c) reações cinéticas e termodinâmicas;
- d) história de soterramento (profundidade da formação rochosa, tempo estimado que ocorreram as transformações litológicas, pressão e temperatura do meio reacional);
- e) domínio espacial (classificado quanto às suas dimensões: *Batch* como sendo uma única célula, *1D* - horizontal ou vertical, *2D* - horizontal ou vertical e *3D*).

Após definir as configurações de simulação, métodos numéricos são utilizados para resolver as equações geoquímicas decorrentes da interação do fluido com a rocha no ambiente geológico definido nas condições iniciais. À medida que o processo de simulação vai

evoluindo, os dados são atualizados a cada passo de simulação. Esse processo ocorre até o sistema atingir o estado estacionário ou chegar no tempo máximo definido pelo usuário.

A saída de dados é o último estágio de cada passo de simulação. Os dados são armazenados em um novo arquivo, geralmente texto, permitindo visualizar o comportamento da simulação. Cada simulador possui um padrão diferente de arquivo de entrada e de saída.

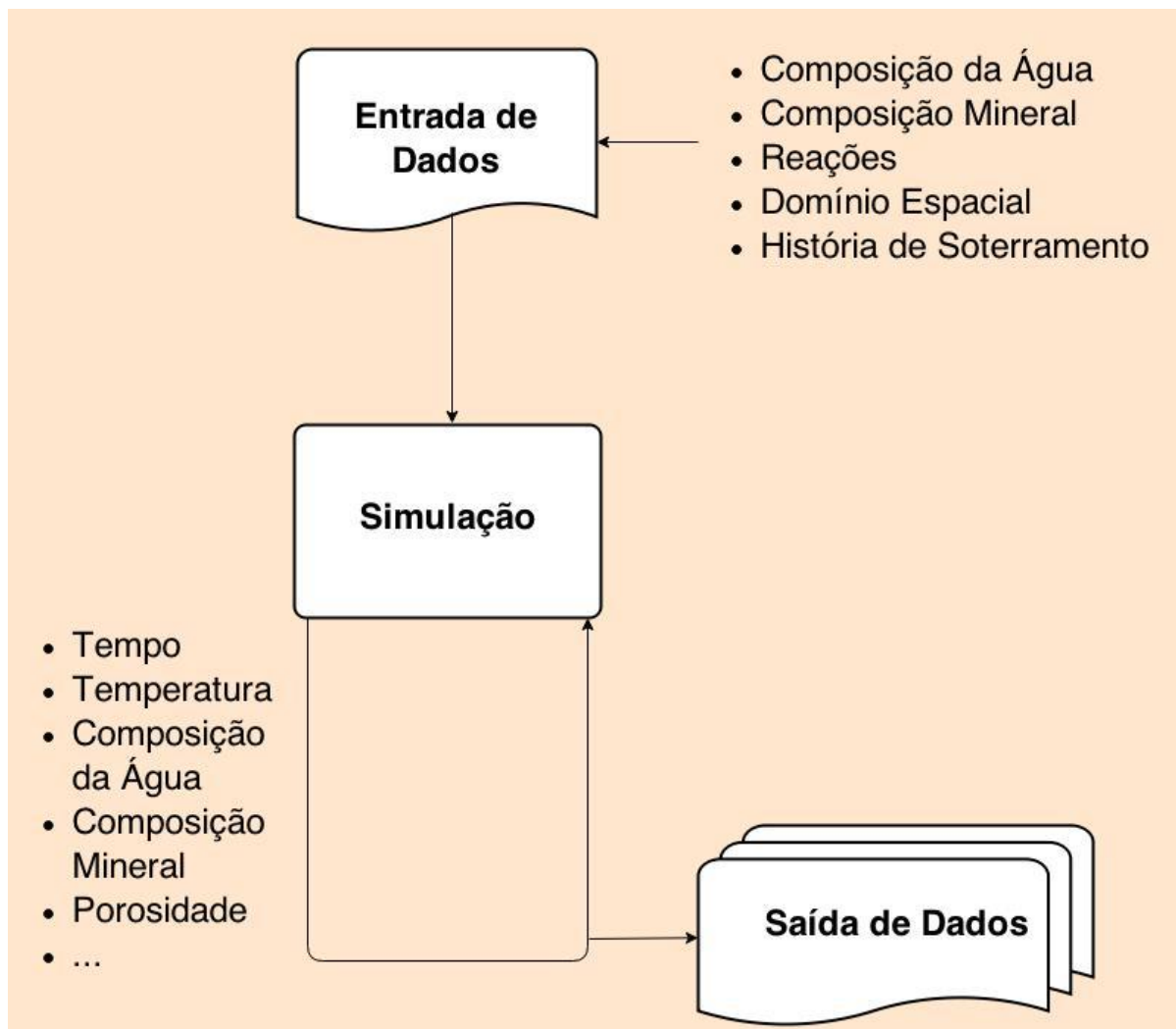


Figura 2.2: Fluxograma das etapas de um processo de simulação



### 3 ESTADO DA ARTE

Mesmo sendo um problema importante para geólogos, não temos nenhum software ou relato na literatura que trate especificamente de simulação diagenética e/ou da visualização desses resultados. Então, são usados softwares de simulação geoquímica, feitos para outros propósitos, mas que podem ser usados para algumas análises. No caso da visualização de resultados, podemos destacar três softwares que tratam dos resultados de tais simulações: PhreeqcI, GWB e PetraSim.

#### 3.1 PhreeqcI

O PhreeqcI é um programa de interface gráfica baseado em janelas para o programa geoquímico PHREEQC (Parkhurst e Appelo, 1999). Ele é usado interativamente para especificar todas as modelagens possíveis do PHREEQC, como especiação, reações em modo “batch”, transporte reativo unidimensional e modelagem inversa.

Depois de realizada a modelagem, o usuário executa a simulação no PHREEQC, que produz resultados de saída, e o PhreeqcI mostra esses resultados. A visualização dos dados de resultado da simulação é feita através de gráficos de linha de duas dimensões (Figura 3.1), com possibilidade de *zooming* e translação de gráfico.

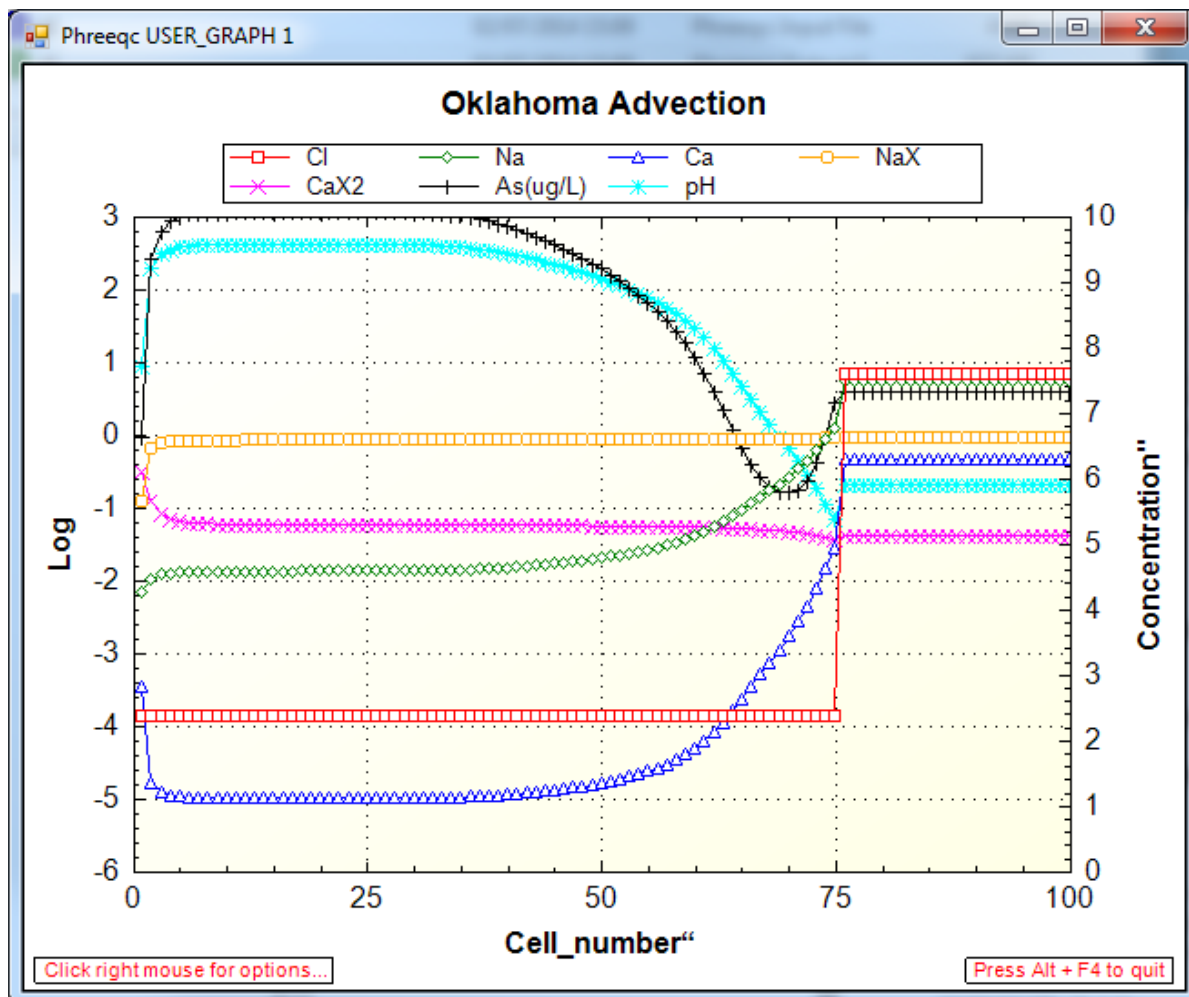


Figura 3.1: Gráfico obtido no PhreeqcI depois de uma simulação exemplo no PHREEQC.

### 3.2 GWB

GWB é um simulador desenvolvido pelo departamento de Geologia da Universidade de Illinois at Urbana-Champaign, em 1978, e comercializado pela Aqueous Solutions LLC. Ele pode ser usado para alguns problemas comuns encontrados em modelagem geoquímica, como especiação em soluções aquosas, modelos de interação água-rocha e mistura de fluidos em simulações em modo “batch” (Bethke, 2008), além de outros problemas químicos, biológicos e geológicos, como simular poluição dos aquíferos, problemas de geomicrobiologia, entre vários outros.

Possui uma interface gráfica para entrada de dados, na qual o usuário preenche os dados de sua simulação, executa a simulação e, durante a simulação, são criados arquivos de saídas, que podem ser abertos com um outro software do GWB, o Xtplot. Neste, o usuário pode visualizar os resultados de suas simulações através de várias técnicas de visualização

2D, como gráficos de linha, de pizza, radiais, mosaicos, “color maps”, de contorno, vetorial entre outros mais específicos para geologia (Figura 3.2).

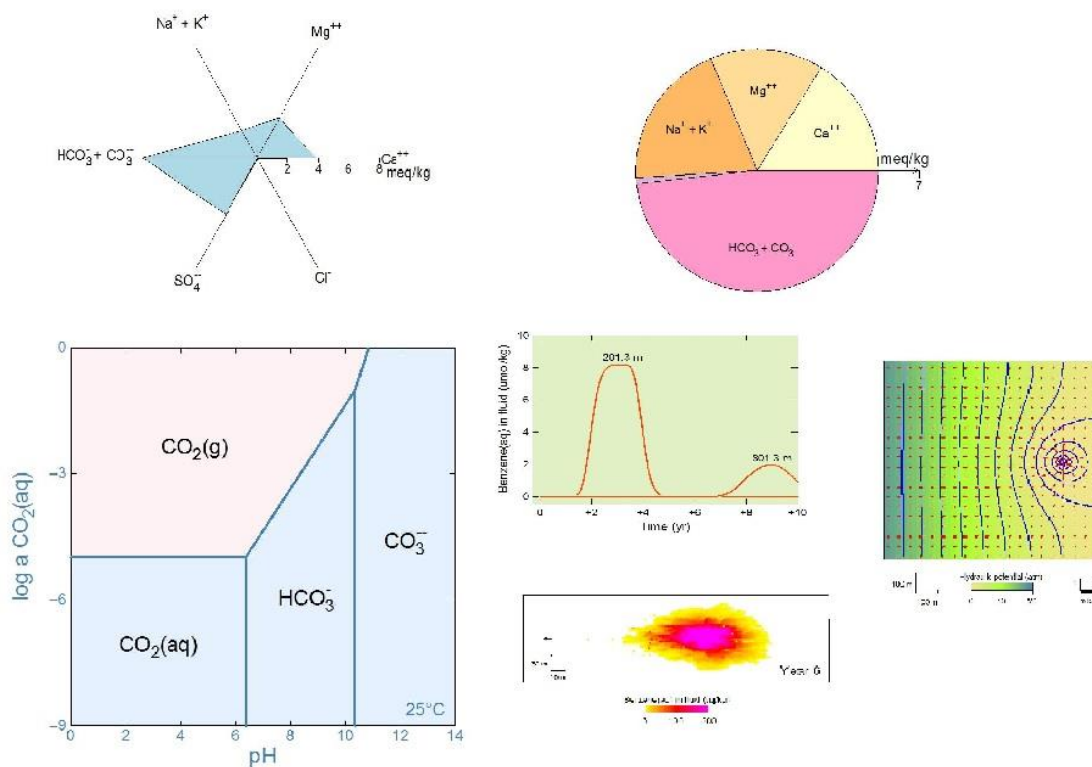


Figura 3.2: Alguns exemplos de gráficos disponíveis para o GWB

### 3.3 PetraSim

O software PetraSim, desenvolvido pela Thunderhead Engineering Consultants, é uma interface gráfica para a família de simuladores TOUGH2. A família TOUGH2, desenvolvida pelo Lawrence Berkeley National Laboratory, são simuladores numéricos para fluxos não-isotérmicos de múltiplos componentes, fluidos multifásicos em meios porosos e fraturados em uma, duas, ou três dimensões, e foram projetados para engenharia geotérmica de reservatórios, eliminação de resíduos nucleares, avaliação ambiental e remediação, e saturação e insaturação de zonas hidrológicas (Pruess et al., 1999).

O PetraSim possui uma interface para criação de modelos 3D de poços, geração de malhas e edição de parâmetros de entrada, como, por exemplo, composição mineral e

composição de água. As técnicas de visualização utilizadas são gráficos de linha, visualização de iso-superfície 3D, gráficos vetoriais e de contorno (Figura 3.3).

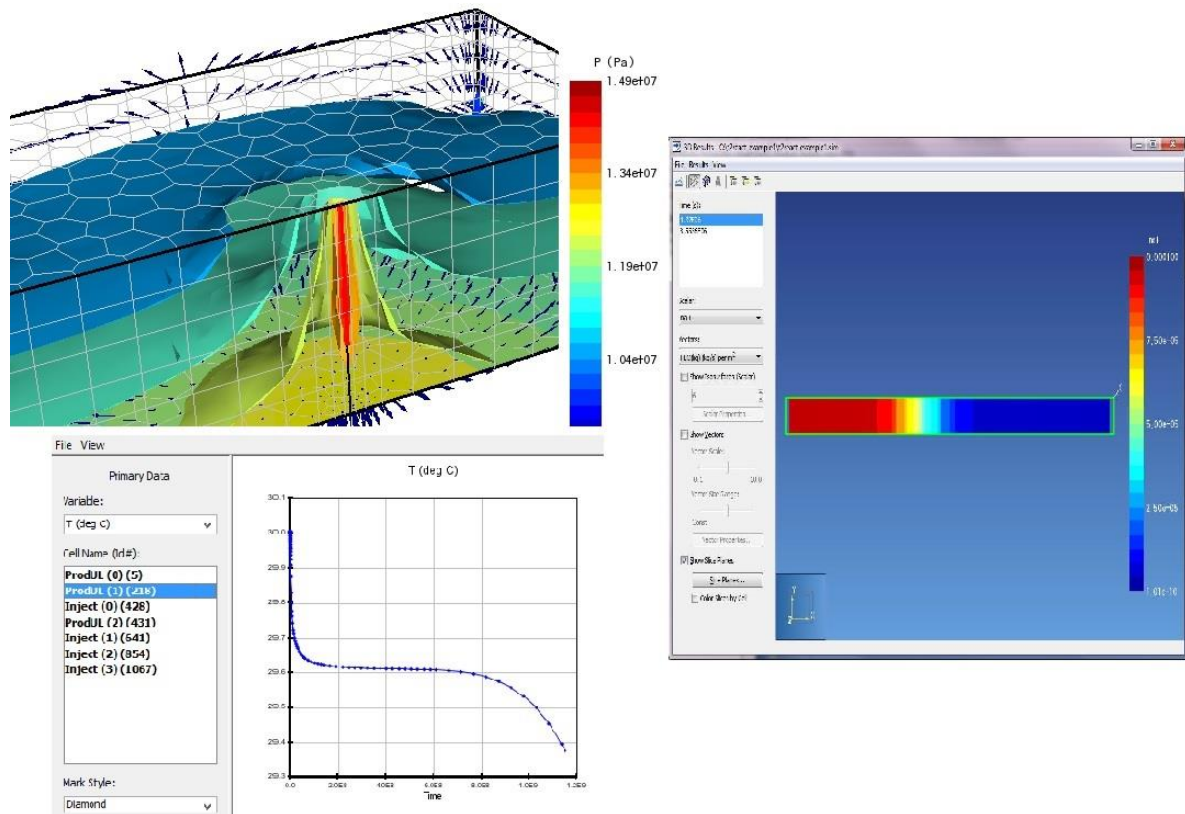


Figura 3.3: Exemplos de gráficos disponíveis no PetraSim

## 4 VISUALIZAÇÃO DE DADOS

Como mostrado no capítulo 3, os softwares utilizados para visualização atualmente não foram desenvolvidos especificamente para os processos de diagênese, mas sim para problemas mais gerais de geoquímica.

Esse capítulo está dividido em três partes, abordando organização e descrição dos dados, seleção de variáveis e técnicas de visualização. Os dados utilizados nas descrições são originados de um simulador próprio que, no presente momento, somente gera resultados para simulações em domínios *Batch* (ou uma célula, sem fluxo) e domínio 1D (somente horizontal, com a possibilidade de fluxo). Os dados de simulação de domínio 2D foram obtidos através de uma versão não-estável, mas serão utilizados como teste para determinar se as técnicas de visualização implementadas no trabalho estão adequadas às necessidades dos usuários especialistas.

### 4.1 Organização e Descrição dos Dados

Os dados a serem visualizados vêm de arquivos de saída gerados pelo simulador, entre eles, são destacados dois tipos de arquivos, o arquivo de cabeçalho (Figura 4.1) e o arquivo de dados (Figura 4.2).

O arquivo de cabeçalho pode ser dividido em três partes. A primeira parte contém dados de sistema, como localização do arquivo de entrada utilizado na simulação e diretório de saída. A segunda parte contém as variáveis e a ordem em que elas aparecem no arquivos de dados. A terceira parte contém informações sobre cada passo de simulação, como informação de quantas células existem em cada eixo, o número de variáveis, o tempo da simulação em milhões de anos e o horário que foi gravado.

O arquivo de dados (Figura 4.2) é um arquivo que é escrito quando ocorre um dos seguintes eventos: quando se passa um certo intervalo de tempo ou quando passa um certo número de iterações de simulação (ambos definidos pelo usuário na entrada dos dados para o simulador). A cada escrita, são colocadas informações de 3 tipos. Primeiro, é colocado o formato do arquivo, o caminho do arquivo, o tempo de simulação do passo e o tempo final de simulação (Primeira linha da Figura 4.2). Em segundo lugar, são as informações sobre cada passo de simulação colocado no arquivo de dados, como informação de quantas células existem em cada eixo, o número de variáveis, o tempo da simulação em milhões de anos e o

horário de gravação (Segunda linha da Figura 4.2). Em terceiro lugar, vem os dados específicos do passo da simulação, onde os três primeiros valores de cada linha referenciam a posição da célula e o resto representa os valores das variáveis referenciadas pelo arquivo de cabeçalho na ordem lá colocada.

Analisando tudo que é oferecido pelos arquivos, podemos definir que tipo esse conjunto de dados representa. Para isso, iremos usar a classificação de Munzner (2014).

O tipo de dado que encontramos é o de campo, já que os dados estão associados com as células. As variáveis associadas às células, as quais estão relacionadas com a distância ou com o tempo, correspondem a dados contínuos.

Cada variável a ser visualizada, que se encontra descrita no arquivo de cabeçalho, em um dos eixos consiste em uma tripla, que contém a variável (temperatura, pressão, fração de volume, entre várias outras), espécie (Quartzo, Calcita, Ca++, etc.) e tipo de espécie. O Tipo da Espécie pode ser quatro valores: Sedimento, que consiste em variáveis físicas em relação ao sedimento (Temperatura, pressão, fluxo, porosidade, entre outras); Minerais, que consiste em variáveis específicas dos minerais, como fração de volume, saturação, e outras; Solutos, que compreende as variáveis dos solutos presentes na água do domínio (concentração, coeficiente de atividade e difusividade); e Elementos, que são as variáveis dos elementos químicos da tabela periódica presentes na simulação que representam a distribuição dos elementos dentro de uma célula (Poros, matriz (ou mineral) e célula).



```

FORMAT 20121020 DOMAIN 0 DATE Tue Sep 02 13:20:44 2014
# output header file
----- executable and command line
C:\Program Files (x86)\DiaBR\SimulatorCore\itagen.wx.exe
-i C:\Users\marcos.PROJPETR\Desktop\Low-Temperature-Simulation\DiaBR\Batch1.gdb
-p C:\Users\marcos.PROJPETR\Desktop\Low-Temperature-Simulation\DiaBR
-n Batch1
----- environment and system
INPUT SDB [ C:\Users\marcos.PROJPETR\Desktop\Low-Temperature-Simulation\DiaBR\Batch1 ]
GRID FILE [ ( null ) ]
OUTPUT KEY [ Batch1 ]
USER [ ( null ) ]
CPU / HOST [ ( null ) ]
PROCESS PID [ 0 ] PPID [ 0 ]
----- control parameters
----- end of list
BEGIN : data header, variables list
1 VAR z SPC sediment UNIT meters TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_1
2 VAR lithology SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_2
3 VAR time sedimentation SPC sediment UNIT my TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_3
4 VAR burial rate SPC sediment UNIT m/my TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_4
5 VAR geothermal gradient SPC sediment UNIT C/km TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_5
6 VAR volume cell SPC sediment UNIT cc TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_6
7 VAR volume pore SPC sediment UNIT cc TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_7
8 VAR fluid pressure SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_8
9 VAR water velocity SPC sediment UNIT cm/yr TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_9
10 VAR water flow wx SPC sediment UNIT cm/yr TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_10
11 VAR water flow wy SPC sediment UNIT cm/yr TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_11
12 VAR water flow wz SPC sediment UNIT cm/yr TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_12
13 VAR temperature SPC sediment UNIT Celsius TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_13
14 VAR porosity SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_14
15 VAR porosity change rate SPC sediment UNIT /my TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_15
16 VAR porosity total change SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_16
17 VAR permeability SPC sediment UNIT md TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_17
18 VAR tortuosity SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_18
19 VAR bulk mass density SPC sediment UNIT g/cc TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_19
20 VAR water charge balance SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_20
21 VAR water ionic strength SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_21
22 VAR water evolution SPC sediment UNIT moles/yr TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_22
23 VAR water evolution cumul. SPC sediment UNIT n/a TYPE SEDIMENT IDX 0 LABEL SED_23
24 VAR pore SPC q UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 1 LABEL VAR_ELEM_1
25 VAR pore SPC h UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 2 LABEL VAR_ELEM_1
26 VAR pore SPC c UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 3 LABEL VAR_ELEM_1
27 VAR pore SPC g1 UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 4 LABEL VAR_ELEM_1
28 VAR pore SPC al UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 5 LABEL VAR_ELEM_1
29 VAR pore SPC k UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 6 LABEL VAR_ELEM_1
30 VAR pore SPC na UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 7 LABEL VAR_ELEM_1
31 VAR pore SPC ga UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 8 LABEL VAR_ELEM_1
32 VAR pore SPC mg UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 9 LABEL VAR_ELEM_1
33 VAR pore SPC cl UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 10 LABEL VAR_ELEM_1
34 VAR matrix SPC g UNIT moles/cc TYPE ELEMENT IDX 1 LABEL VAR_ELEM_2
161 VAR number density SPC halite UNIT /cc TYPE SOLID IDX 9 LABEL VAR_SOLID_7
162 VAR number density SPC dolomite UNIT /cc TYPE SOLID IDX 10 LABEL VAR_SOLID_7
162 END LIST
-----#
# incremental update on output data :
# format : 'SEGMENT' NX NZ NVAR : output count, time (my), ntimesteps : output (wallclock) time
-----#
SEGMENT 1 1 162 : 1 0 1 dt 6.89153e-009 vxs 1409674845 : 0.000277778 0 hrs Tue Sep 02 13:20:45 2014
SEGMENT 1 1 162 : 2 51.6064 500001 dt 9.38229e-005 vxs 1409675313 : 0.130278 0.13 hrs Tue Sep 02 13:28:33 2014
SEGMENT 1 1 162 : 3 154.256 1000001 dt 0.00012111 vxs 1409675768 : 0.256667 0.256389 hrs Tue Sep 02 13:36:08 2014
SEGMENT 1 1 162 : 4 243.666 1500001 dt 0.000183922 vxs 1409676222 : 0.382778 0.382778 hrs Tue Sep 02 13:43:42 2014
SEGMENT 1 1 162 : 5 250 1535872 dt 0.000254567 vxs 1409676255 : 0.391944 0.391667 hrs Tue Sep 02 13:44:15 2014
SEGMENT 1 1 162 : 6 337.812 2035872 dt 0.000171534 vxs 1409676709 : 0.518056 0.517778 hrs Tue Sep 02 13:51:49 2014
SEGMENT 1 1 162 : 7 425.323 2535872 dt 0.000188209 vxs 1409677162 : 0.643889 0.643889 hrs Tue Sep 02 13:59:22 2014
SEGMENT 1 1 162 : 8 500 2962704 dt 0.000150599 vxs 1409677549 : 0.751389 0.751111 hrs Tue Sep 02 14:05:49 2014
SEGMENT 1 1 162 : 9 587.48 3462704 dt 0.000194399 vxs 1409678001 : 0.876944 0.876944 hrs Tue Sep 02 14:13:21 2014
SEGMENT 1 1 162 : 10 674.966 3962704 dt 0.000181302 vxs 1409678455 : 1.00306 1.00278 hrs Tue Sep 02 14:20:55 2014
SEGMENT 1 1 162 : 11 750 4391493 dt 0.000145591 vxs 1409678844 : 1.11111 1.11111 hrs Tue Sep 02 14:27:24 2014
SEGMENT 1 1 162 : 12 837.502 4891493 dt 0.000159744 vxs 1409679298 : 1.23722 1.23694 hrs Tue Sep 02 14:34:58 2014
SEGMENT 1 1 162 : 13 925.02 5391493 dt 0.000175273 vxs 1409679750 : 1.36278 1.3625 hrs Tue Sep 02 14:42:30 2014
SEGMENT 1 1 162 : 14 1000 5819841 dt 0.000179408 vxs 1409680145 : 1.4725 1.47222 hrs Tue Sep 02 14:49:05 2014
SEGMENT 1 1 162 : 15 1087.53 6319841 dt 0.000167322 vxs 1409680598 : 1.59833 1.59806 hrs Tue Sep 02 14:56:38 2014
SEGMENT 1 1 162 : 16 1175.08 6819841 dt 0.000183587 vxs 1409681051 : 1.72417 1.72417 hrs Tue Sep 02 15:04:11 2014
SEGMENT 1 1 162 : 17 1250 7247731 dt 0.000163719 vxs 1409681439 : 1.83194 1.83167 hrs Tue Sep 02 15:10:39 2014
SEGMENT 1 1 162 : 18 1337.57 7747731 dt 0.000152689 vxs 1409681892 : 1.95778 1.9575 hrs Tue Sep 02 15:18:12 2014
SEGMENT 1 1 162 : 19 1425.14 8247731 dt 0.000142403 vxs 1409682344 : 2.08333 2.08333 hrs Tue Sep 02 15:25:44 2014
SEGMENT 1 1 162 : 20 1500 8675085 dt 0.000208651 vxs 1409682731 : 2.19083 2.19056 hrs Tue Sep 02 15:32:11 2014
SEGMENT 1 1 162 : 21 1587.59 9175085 dt 0.000165405 vxs 1409683184 : 2.31667 2.31667 hrs Tue Sep 02 15:39:44 2014
SEGMENT 1 1 162 : 22 1675.2 9675085 dt 0.000181485 vxs 1409683639 : 2.44306 2.44278 hrs Tue Sep 02 15:47:19 2014
SEGMENT 1 1 162 : 23 1750 10101982 dt 0.000177843 vxs 1409684026 : 2.55056 2.55056 hrs Tue Sep 02 15:53:46 2014
SEGMENT 1 1 162 : 24 1837.62 10601982 dt 0.000195132 vxs 1409684481 : 2.67694 2.67667 hrs Tue Sep 02 16:01:21 2014
SEGMENT 1 1 162 : 25 1925.25 11101982 dt 0.000181986 vxs 1409684935 : 2.80306 2.80306 hrs Tue Sep 02 16:08:55 2014
SEGMENT 1 1 162 : 26 2000 11528435 dt 0.000189516 vxs 1409685323 : 2.91083 2.91056 hrs Tue Sep 02 16:15:23 2014
SEGMENT 1 1 162 : 27 2087.65 12028435 dt 0.000150236 vxs 1409685776 : 3.03667 3.03639 hrs Tue Sep 02 16:22:56 2014
SEGMENT 1 1 162 : 28 2175.31 12528435 dt 0.000193931 vxs 1409686228 : 3.16222 3.16194 hrs Tue Sep 02 16:30:28 2014
SEGMENT 1 1 162 : 29 2250 12954383 dt 0.000189837 vxs 1409686614 : 3.26944 3.26917 hrs Tue Sep 02 16:36:54 2014
SEGMENT 1 1 162 : 30 2337.68 13454383 dt 0.000150491 vxs 1409687069 : 3.39583 3.39556 hrs Tue Sep 02 16:44:29 2014
SEGMENT 1 1 162 : 31 2425.37 13954383 dt 0.00019426 vxs 1409687522 : 3.52167 3.52139 hrs Tue Sep 02 16:52:02 2014
SEGMENT 1 1 162 : 32 2500 14379910 dt 0.00018874 vxs 1409687908 : 3.62889 3.62861 hrs Tue Sep 02 16:58:28 2014
SEGMENT 1 1 162 : 33 2587.7 14879910 dt 0.000149621 vxs 1409688361 : 3.75472 3.75444 hrs Tue Sep 02 17:06:01 2014
SEGMENT 1 1 162 : 34 2675.42 15379910 dt 0.000193136 vxs 1409688813 : 3.88028 3.88028 hrs Tue Sep 02 17:13:33 2014
SEGMENT 1 1 162 : 35 2750 15804952 dt 0.000190101 vxs 1409689198 : 3.98722 3.98722 hrs Tue Sep 02 17:19:58 2014
SEGMENT 1 1 162 : 36 2837.73 16304952 dt 0.000177294 vxs 1409689651 : 4.11306 4.11278 hrs Tue Sep 02 17:27:31 2014
SEGMENT 1 1 162 : 37 2925.48 16804952 dt 0.000194529 vxs 1409690104 : 4.23889 4.23861 hrs Tue Sep 02 17:35:04 2014
SEGMENT 1 1 162 : 38 3000 17229550 dt 0.000147012 vxs 1409690489 : 4.34583 4.34556 hrs Tue Sep 02 17:41:29 2014
SEGMENT 1 1 162 : 39 3087.76 17729550 dt 0.000189768 vxs 1409690942 : 4.47167 4.47139 hrs Tue Sep 02 17:49:02 2014
SEGMENT 1 1 162 : 40 3175.53 18229550 dt 0.000150436 vxs 1409691395 : 4.5975 4.59722 hrs Tue Sep 02 17:56:35 2014
SEGMENT 1 1 162 : 41 3250 18653716 dt 0.00015358 vxs 1409691780 : 4.70444 4.70417 hrs Tue Sep 02 18:03:00 2014
SEGMENT 1 1 162 : 42 3337.79 19153716 dt 0.000198246 vxs 1409692233 : 4.83028 4.83 hrs Tue Sep 02 18:10:33 2014
SEGMENT 1 1 162 : 43 3425.59 19653716 dt 0.000184891 vxs 1409692686 : 4.95611 4.95583 hrs Tue Sep 02 18:18:06 2014
SEGMENT 1 1 162 : 44 3500 20077423 dt 0.000182086 vxs 1409693069 : 5.0625 5.0625 hrs Tue Sep 02 18:24:29 2014

```

Figura 4.1: Exemplo de um arquivo de cabeçalho

```

FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 0 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 1 0 1 dt 6.89153e-009 yrs 1409674845 : 0.000277778 0 hrs Tue Sep 02 13:20:45 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -9.52653 -6.56515e-014 0 3.75 2.46899 -0.00439603 3.07866 0.0
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 51.6064 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 2 51.6064 500001 dt 9.38229e-005 yrs 1409675313 : 0.130278 0.13 hrs Tue Sep 02 13:28:33 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 0.000304483 3.44536e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439603 3.07865 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 154.256 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 3 154.256 1000001 dt 0.00012111 yrs 1409675768 : 0.256667 0.256389 hrs Tue Sep 02 13:36:08 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000132808 3.70231e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439603 3.07864 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 243.666 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 4 243.666 1500001 dt 0.000183922 yrs 1409676222 : 0.382778 0.382778 hrs Tue Sep 02 13:43:42 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.00020403 2.12694e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07863 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 250 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 5 250 1535872 dt 0.000254567 yrs 1409676255 : 0.391944 0.391667 hrs Tue Sep 02 13:44:15 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000205468 1.997e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07863 -8
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 337.812 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 6 337.812 2035872 dt 0.000171534 yrs 1409676709 : 0.518056 0.517778 hrs Tue Sep 02 13:51:49 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000223174 9.81999e-010 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07862 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 425.323 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 7 425.323 2535872 dt 0.000188209 yrs 1409677162 : 0.643889 0.643889 hrs Tue Sep 02 13:59:22 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000228564 -1.88085e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07861 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 500 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 8 500 2962704 dt 0.000150599 yrs 1409677549 : 0.751389 0.751111 hrs Tue Sep 02 14:05:49 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000231989 -3.59762e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07861 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 587.48 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 9 587.48 3462704 dt 0.000194399 yrs 1409678001 : 0.876944 0.876944 hrs Tue Sep 02 14:13:21 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000232976 -5.62738e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.0786 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 674.966 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 10 674.966 3962704 dt 0.000181302 yrs 1409678455 : 1.00306 1.00278 hrs Tue Sep 02 14:20:55 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000233807 -7.67138e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07859 -
FORMAT 20121020 DOMAIN 0 FILE Batch1 TIMESIM 750 TIMEEND 5000
SEGMENT 1 1 1 162 : 11 750 4391493 dt 0.000145591 yrs 1409678844 : 1.11111 1.11111 hrs Tue Sep 02 14:27:24 2014
0.5 0 0 -1 0 -0 0 100 14.3 1033.23 0 0 0 25 0.143 -0.000235823 -9.43294e-008 0 3.75 2.46899 -0.00439602 3.07858
.....
FORMAT 20121020 DOMAIN 1 FILE C:\Users\LEONARDO\Desktop\translator\step3\TESTECopy TIMESIM 0 TIMEEND 5000
SEGMENT 10 1 1 211 : 1 0 1 dt 7.27856e-011 yrs 1394218422 : 0.000555556 0.000555556 hrs Fri Mar 07 16:53:42 2014
0.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0 0.46875 0 0 35 0.096 -3651.65 -2.65785e-013 0 3.75 2.81 -0.00657393 1.60871
0.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.096 -3651.65 -2.65785e-013 0 3.75 2.81 -0.00657393 1.60871
1.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.096 -3651.65 -2.65785e-013 0 3.75 2.81 -0.00657393 1.60871
1.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.096 -3651.65 -2.65785e-013 0 3.75 2.81 -0.00657393 1.60871
2.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.096 -3651.65 -2.65785e-013 0 3.75 2.81 -0.00657393 1.60871
2.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -6662.52 -4.84941e-013 0 3.75 2.8 -0.00691632 1.60871
3.25 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -6662.52 -4.84941e-013 0 3.75 2.8 -0.00691632 1.60871
3.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -6662.52 -4.84941e-013 0 3.75 2.8 -0.00691632 1.60871
4.25 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -6662.52 -4.84941e-013 0 3.75 2.8 -0.00691632 1.60871
4.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -6662.52 -4.84941e-013 0 3.75 2.8 -0.00691632 1.60871
FORMAT 20121020 DOMAIN 1 FILE C:\Users\LEONARDO\Desktop\translator\step3\TESTECopy TIMESIM 0.138714 TIMEEND 5000
SEGMENT 10 1 1 211 : 2 0.138714 10001 dt 1.50524e-005 yrs 1394218536 : 0.0322222 0.0322222 hrs Fri Mar 07 16:55:36 2014
0.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.0959999 -0.531846 -7.45148e-008 0 3.75 2.81 -0.00657396 1.6
0.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.0959999 -0.531768 -7.45074e-008 0 3.75 2.81 -0.00657396 1.6
1.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.0959999 -0.531768 -7.45074e-008 0 3.75 2.81 -0.00657396 1.6
1.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.0959999 -0.531768 -7.45074e-008 0 3.75 2.81 -0.00657396 1.6
2.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.46875 0 0 35 0.0959999 -0.531756 -7.45071e-008 0 3.75 2.81 -0.00657396 1.6
2.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.712958 -1.00062e-007 0 3.75 2.8 -0.00691638 1.6086
3.25 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.712945 -1.00061e-007 0 3.75 2.8 -0.00691638 1.6086
3.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.712944 -1.00061e-007 0 3.75 2.8 -0.00691638 1.6086
4.25 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.712944 -1.00061e-007 0 3.75 2.8 -0.00691638 1.6086
4.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.712945 -1.00061e-007 0 3.75 2.8 -0.00691638 1.6086
FORMAT 20121020 DOMAIN 1 FILE C:\Users\LEONARDO\Desktop\translator\step3\TESTECopy TIMESIM 0.294903 TIMEEND 5000
SEGMENT 10 1 1 211 : 3 0.294903 20001 dt 1.58338e-005 yrs 1394218570 : 0.0416667 0.0416667 hrs Fri Mar 07 16:56:10 2014
0.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.468751 0 0 35 0.0959998 -0.521558 -1.56774e-007 0 3.75 2.81 -0.00657401 1.
0.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.468751 0 0 35 0.0959998 -0.521356 -1.56746e-007 0 3.75 2.81 -0.00657399 1.
1.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.468751 0 0 35 0.0959998 -0.521355 -1.56746e-007 0 3.75 2.81 -0.00657399 1.
1.75 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.468751 0 0 35 0.0959998 -0.521324 -1.56743e-007 0 3.75 2.81 -0.00657399 1.
2.25 0 0 -3100 2 0 -0 30 50 4.8 1033.23 0 0.468751 0 0 35 0.0959998 -0.521324 -1.56743e-007 0 3.75 2.81 -0.00657399 1.
2.75 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.696047 -2.1009e-007 0 3.75 2.8 -0.00691645 1.60855
3.25 0 0 -3100 3 0 -0 30 50 5.05 1033.23 0 0.445545 0 0 35 0.101 -0.695997 -2.10085e-007 0 3.75 2.8 -0.00691645 1.6085

```

Figura 4.2: À esquerda, um exemplo de arquivo de dados de uma simulação em modo “Batch” e à direita um exemplo de arquivo de dados de uma simulação em 1D



## 4.2 Técnicas de Visualização

Considerando que as visualizações serão geradas para apresentar os dados armazenados nos arquivos de saída, e que contém os valores de variáveis atualizadas durante a simulação, a cada passo, foi desenvolvida inicialmente uma interface para a seleção das variáveis a serem visualizadas. Esta seção, portanto, descreve inicialmente, a interface e, depois, as visualizações que podem ser geradas.

### 4.2.1 Interface para configuração das visualizações

O processo para geração das visualizações pode ser descrito em passos bem definidos, representados através das figuras 4.3 a 4.7.

1. Selecionar o arquivo correspondente à simulação cujos resultados deseja-se visualizar.

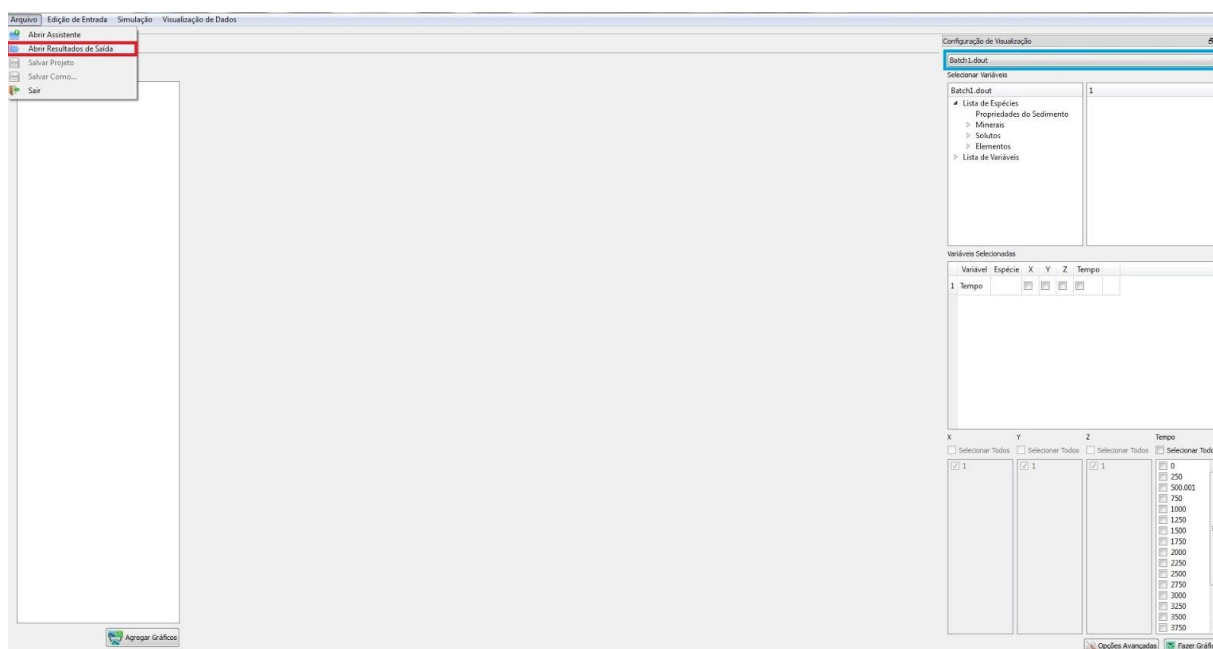


Figura 4.3: O retângulo vermelho representa a opção, em menu, para selecionar os resultados da simulação em arquivo. O retângulo azul representa a lista de simulações disponíveis, acessíveis através de uma Combo Box

2. Selecionar as variáveis que podem ser visualizadas. Cada objeto a ser visualizado é pertencente aos grupos especificados na seção anterior. Temos, por exemplo, o Quartzo, que é um mineral, descrito (na simulação) por variáveis como fração de volume, saturação, etc. Os

outros minerais também possuem essas variáveis. Então, o usuário pode optar por duas ordens de escolha: optando pelo mineral cujo comportamento durante a simulação ele quer visualizar, ou optando por visualizar o comportamento de um conjunto de minerais em relação a alguma variável.

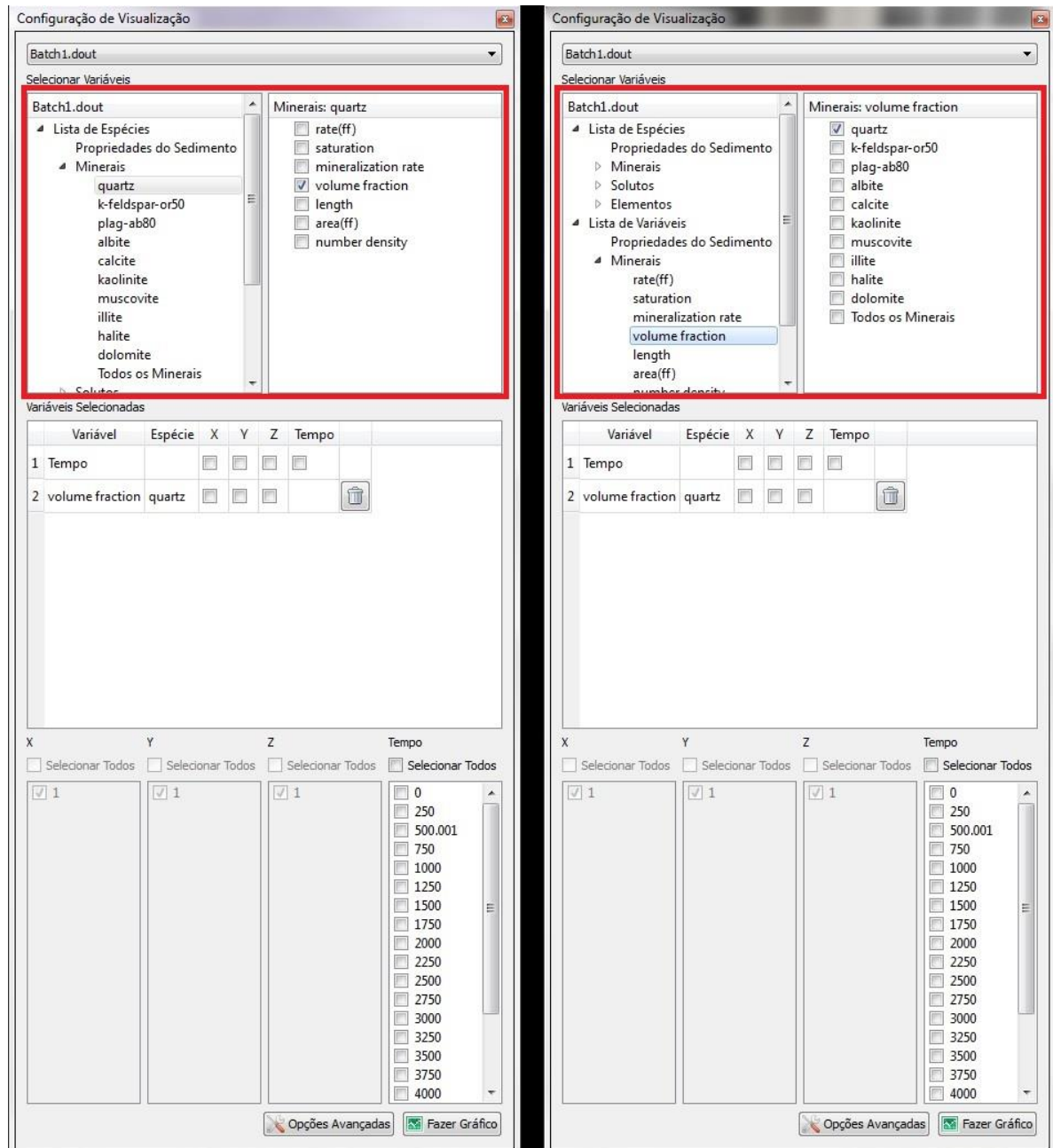


Figura 4.4: Tela da interface gráfica mostrando, à esquerda, a opção para analisar uma espécie mineral, e à direita a opção por analisar uma variável em diferentes minerais.

3. Configurar os eixos do gráfico a ser gerado. Existem 4 eixos que o usuário pode selecionar: X, Y, Z e Tempo. Os três primeiros representam eixos no espaço: o usuário deve selecionar no mínimo dois desses três. O eixo de Tempo é um eixo que é utilizado para

animação. O tipo de gráfico a ser visualizado dependerá de como o usuário seleciona os eixos. Nota-se, também, a necessidade de, quando selecionado Tempo ou Distância em relação a alguma direção, a lista de seleção referente ao que foi selecionado será escondida (como mostrado na Figura 4.5).

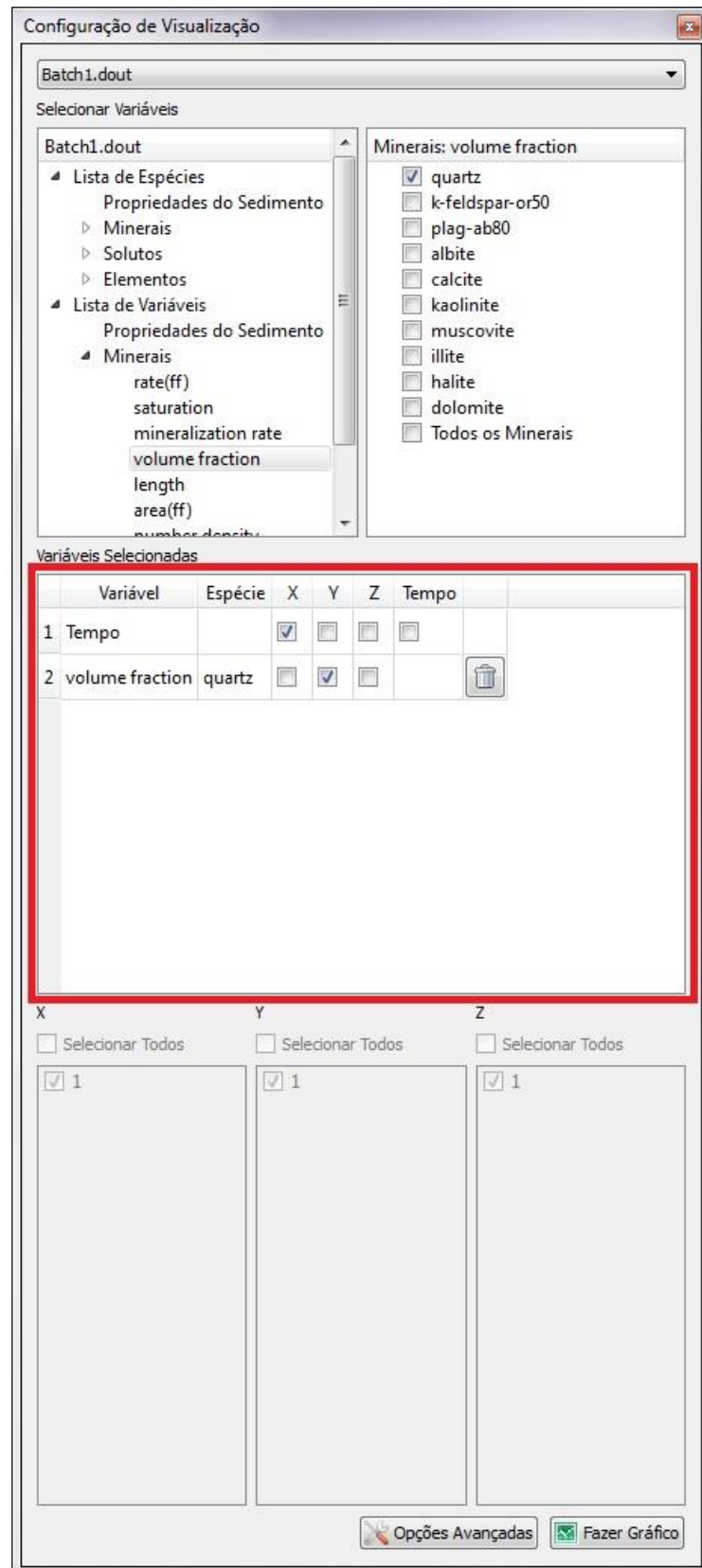


Figura 4.5: Tela da interface gráfica mostrando a seleção de dois eixos para o gráfico.

4. Selecionar células ou tempo. É necessário que o usuário especifique a quais células estão associadas as variáveis que ele deseja analisar. São quatro listas a serem configuradas: X, Y, Z e Tempo. X, Y e Z representam as dimensões do domínio que está sendo simulado e o Tempo representa os passos de simulação registrados nos arquivos de saída. Para a geração dos gráficos, é feita uma combinação dessas quatro seleções.

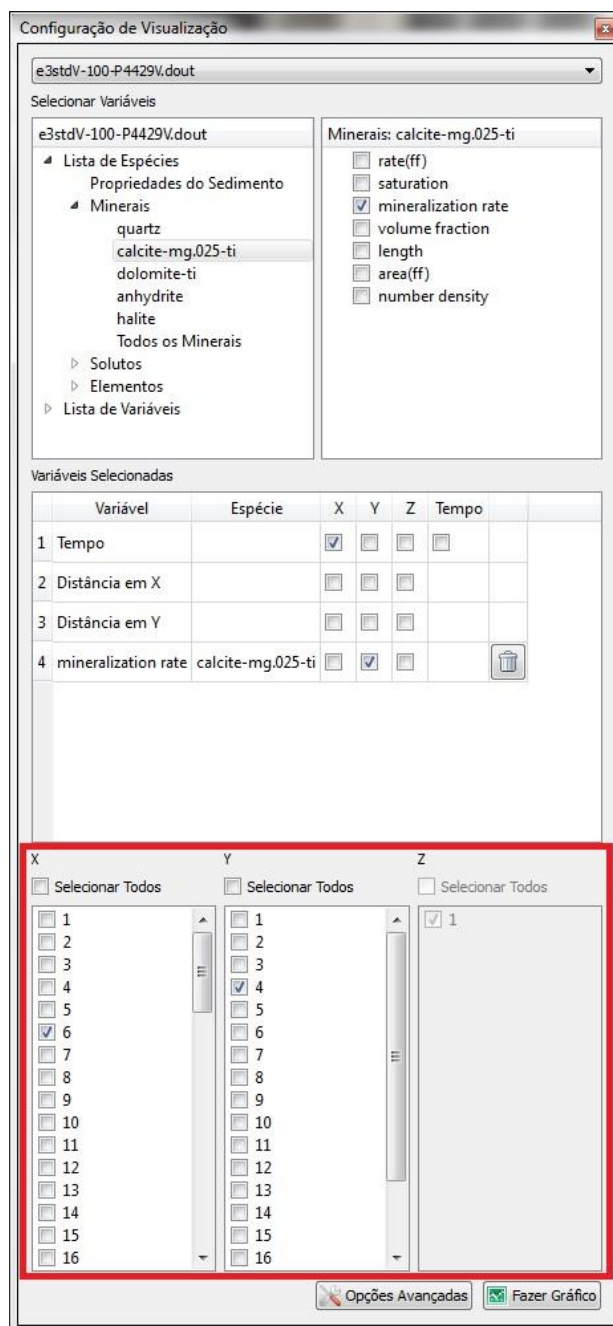


Figura 4.6: Utilizando um exemplo de simulação em 2D. O usuário seleciona a célula no espaço cujos dados ao longo do tempo ele quer visualizar: mineralization rate do mineral calcita ao longo do tempo, na célula selecionada (6,4).

5. Configurar escalas. Por padrão, a escala é tratada automaticamente de acordo com os valores que serão visualizados, mas o usuário pode definir uma escala para obter visões diferentes dos dados, assim como pode também utilizar escala logarítmica.

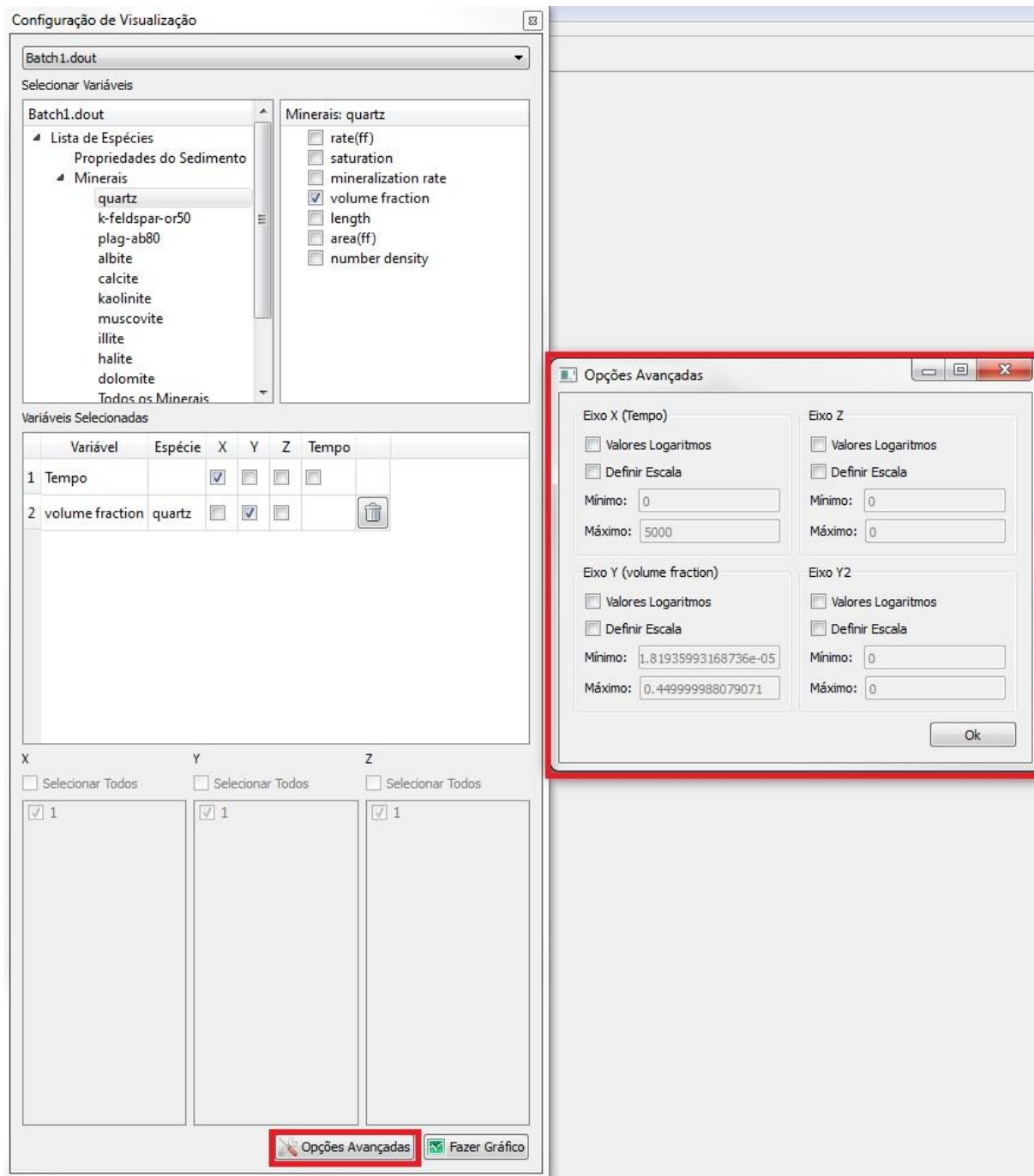


Figura 4.7: Tela da interface gráfica e da janela de opções avançadas.

6. Visualizar gráfico. Depois de todos os passos acima efetuados, o usuário terá seu gráfico gerado na área de desenho.

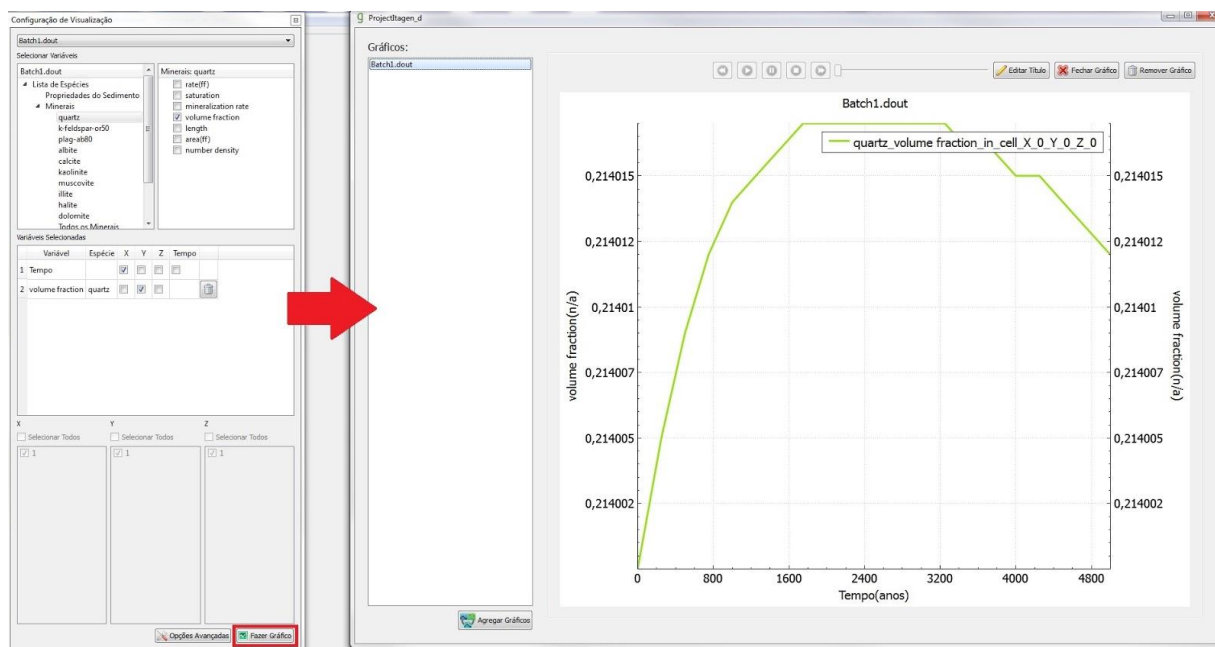


Figura 4.8: Visualização do gráfico resultante da configuração.

## 4.2.2 Técnicas de Visualização

Para a implementação das técnicas, foram utilizadas duas bibliotecas: QCustomPlot e QwtPlot3D. A QCustomPlot é uma biblioteca de visualização de gráficos 2D em Qt para C++ com código aberto, cuja última versão estável é de abril de 2014. As técnicas de visualização que podem ser implementadas utilizando-a são: gráficos de linhas, gráficos de dispersão, mapas de cores 2D, gráficos de barra (tanto simples, como empilhados) e gráficos do tipo *box plots*. As formas de interação abrangidas pela biblioteca são: *panning*, *zooming*, seleção de curva e seleção de eixo. A QwtPlot3D é uma biblioteca de visualização de gráficos 3D em Qt e OpenGL para C++ com código aberto, cuja última versão é de junho de 2007. As técnicas de visualização que podem ser implementadas utilizando-a são: gráficos de superfície, de volume, de barras 3D e vetorial. As formas de interação abrangidas pela biblioteca são: *panning*, *zooming* e rotação.

Analisando as características dos dados, o que temos no estado da arte e as inúmeras interações com os usuários, chegamos aos seguintes tipos de gráficos:

1. Gráficos de linha simples. Os gráficos de linha são usados quando um dos eixos representa uma variável contínua registrada ao longo do tempo ou em distância.

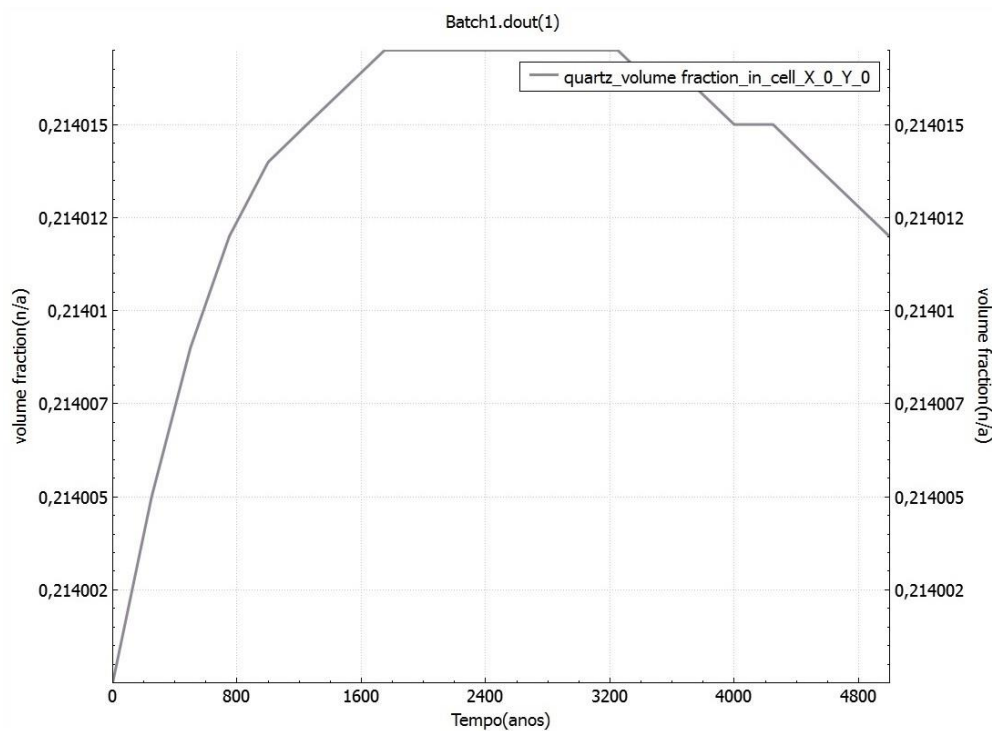


Figura 4.9: Gráfico de linha da fração de volume de quartzo ao longo da simulação

2. Gráficos de linha com dois eixos Y. São gráficos de linha que servem para realizar comparação entre duas variáveis em relação ao tempo ou à distância em algum sentido;

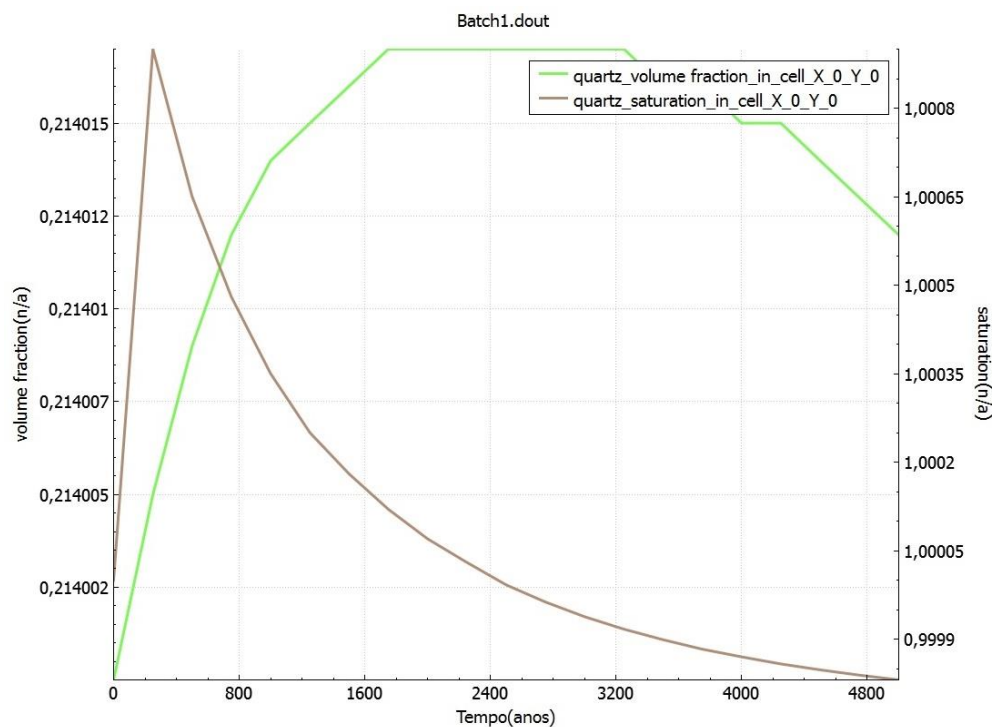


Figura 4.10: Gráfico de linha com dois eixos verticais, comparando fração de volume de quartzo com seu índice de saturação ao longo do tempo de simulação.





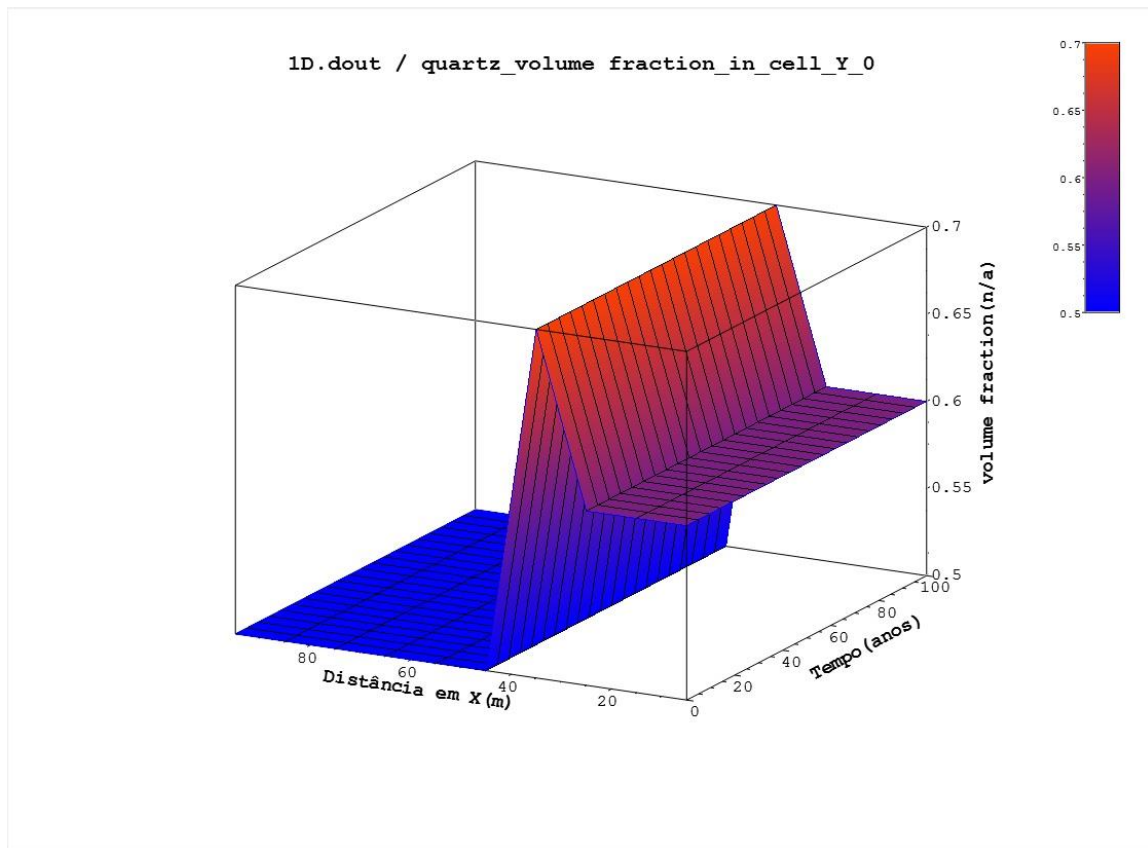


Figura 4.12: Gráfico de superfície de uma simulação 1D visualizando a fração de volume de Quartzo em relação ao tempo e a distância

Muitas vezes, a visualização 3D pode não ser suficiente para representar o que o usuário quer visualizar. Por exemplo, uma visualização de um domínio 2D, na qual o usuário pode querer observar o comportamento de uma variável em todo o domínio durante o tempo (ou seja, teríamos quatro dimensões). Ou o usuário pode desejar fazer uma análise da variação de valores de um corte de um domínio de uma simulação em 2D. Então, para darmos suporte a esses casos, foi usada a técnica de animação de gráficos em relação ao tempo. Dois momentos de duas animações desse tipo podem ser vistos nas figuras 4.13 e 4.14.

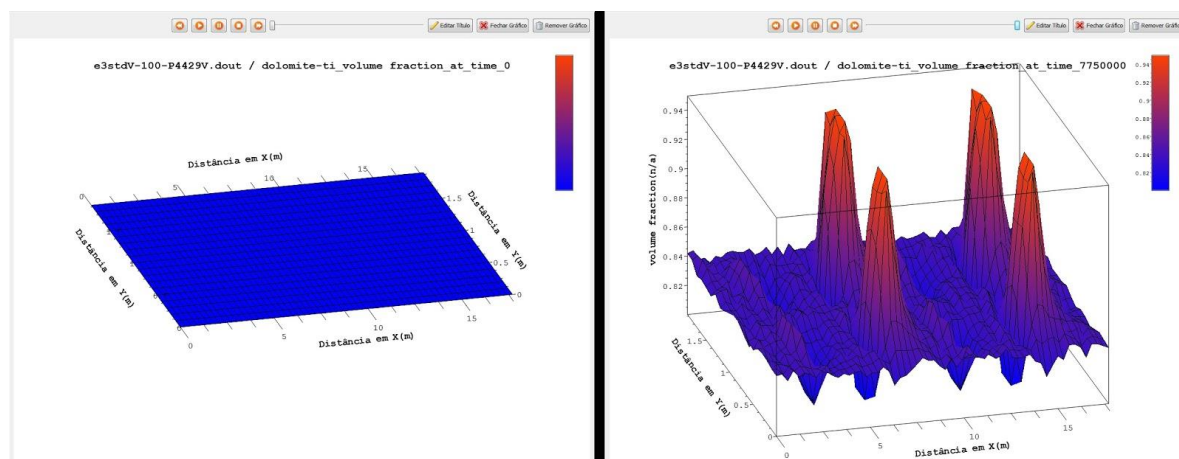


Figura 4.13: Gráfico 3D sendo animado

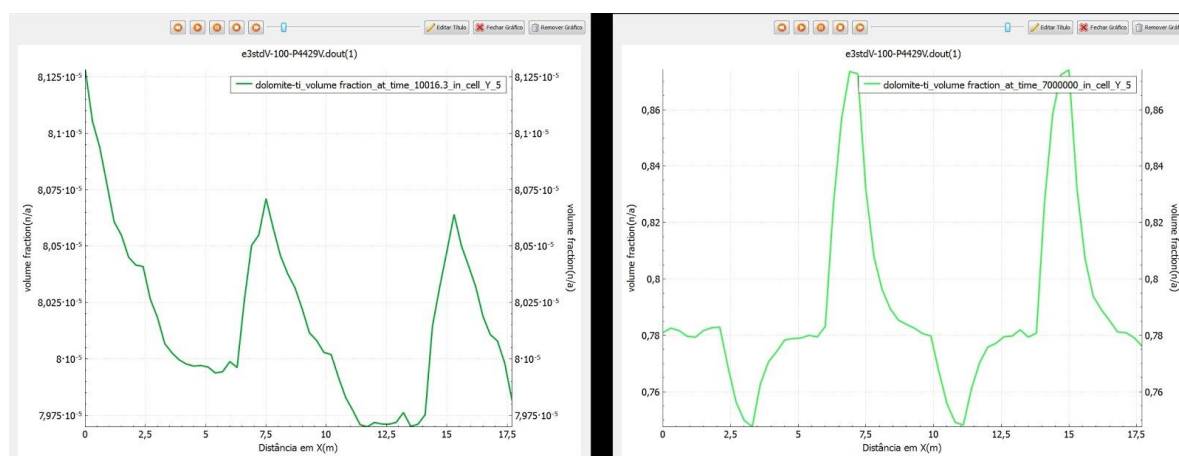


Figura 4.14: Gráfico de linha 2D sendo animado

## 5 ESTUDOS DE CASOS

Apesar das visualizações terem sido desenvolvidas junto aos usuários, para comprovar sua adequação, foram feitas entrevistas de modo que fosse obtida uma lista de variáveis relevantes em cada tipo de simulação (Batch, 1D e 2D). Através dessas entrevistas, chegou-se à seguinte lista:

- Variáveis necessárias em todos os casos:
  - Temperatura;
  - Porosidade;
  - Taxa de mudança de porosidade;
  - Saturação de minerais;
  - Fração de volume de minerais.
- Para 1D:
  - Velocidade de fluxo de água;
  - Permeabilidade.
- Para 2D:
  - Permeabilidade;
  - Densidade do volume total;
  - Velocidade de fluxo em cada sentido.

Assim, a título de estudos de casos, foram executadas simulações de cada caso, cujos resultados são mostrados a seguir.

Para a simulação em modo Batch, foi utilizada a composição de água conforme os estudos de Nordstrom (1994) e composição litológica segundo os trabalhos realizados por Baccar e Fritz (1993) e Morad (1990).

Os dados utilizados no modo 1D foram adaptados das mesmas fontes do Batch. E os dados no modo 2D são de teste, não baseados na literatura.

## 5.1 Simulação Batch

A utilização da temperatura permite identificar em qual fase diagenética as reações estão ocorrendo em um ambiente geológico. Conforme estudos realizados por Morad (1990), a Figura 5.1 nos revela um ambiente eodiagenético com temperatura de aproximadamente 25°C. Nestas condições, as reações ocorrem com menor intensidade devido a baixa energia cinética envolvida. A não variação de temperatura, durante o tempo de simulação, caracteriza a baixa reatividade do sistema.

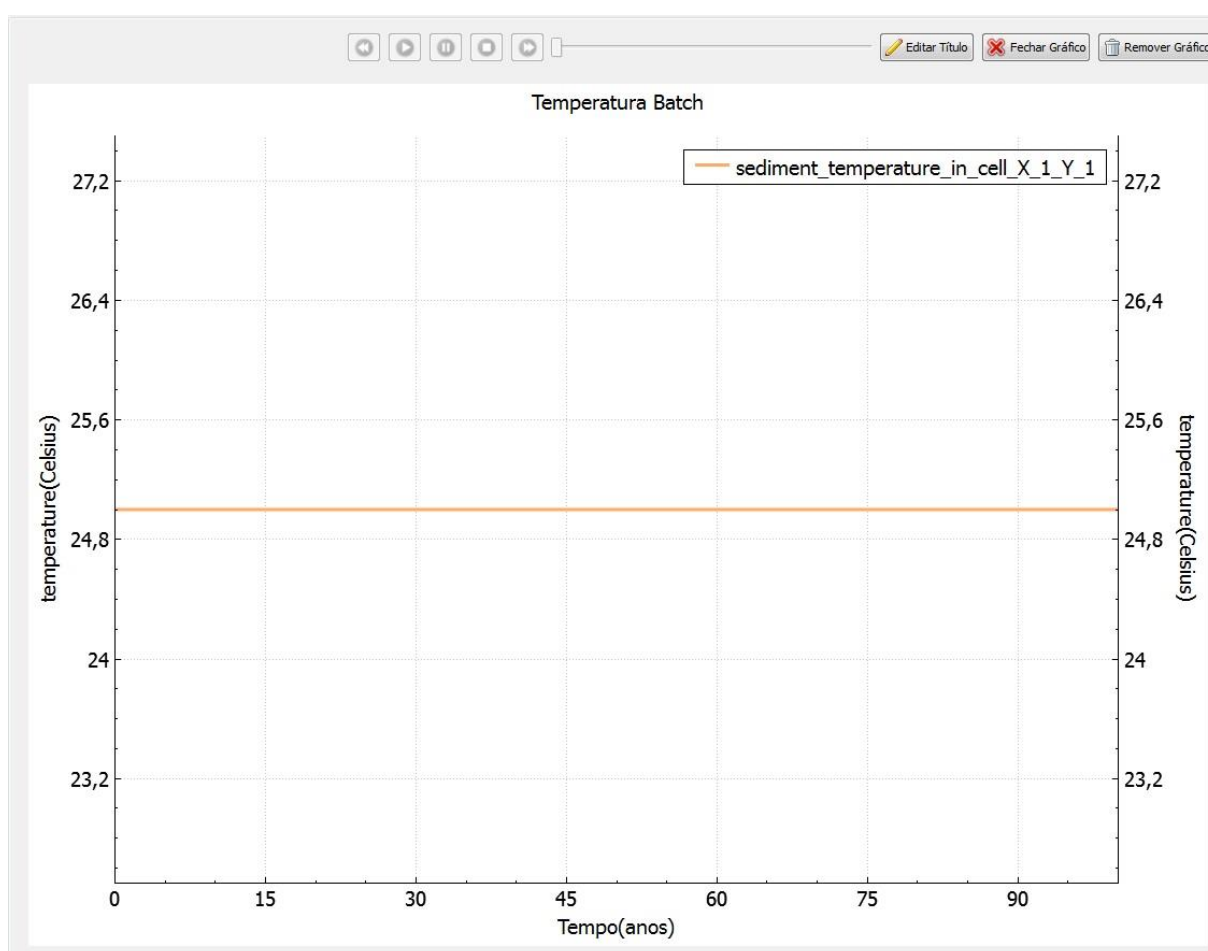


Figura 5.1: Gráfico da temperatura da simulação batch, mostrando que a temperatura, durante a simulação, permaneceu constante

A Figura 5.2 nos mostra uma pequena variação na porosidade devido à baixa reatividade do sistema geológico. Com o passar dos anos, a formação rochosa é submetida a transformações em sua estrutura devido ao fluido que interagiu na rocha. Alguns minerais,

que antes estavam dissolvidos na fase aquosa, estão precipitando na forma de cimento preenchendo os espaços vazios, antes ocupados pela água.

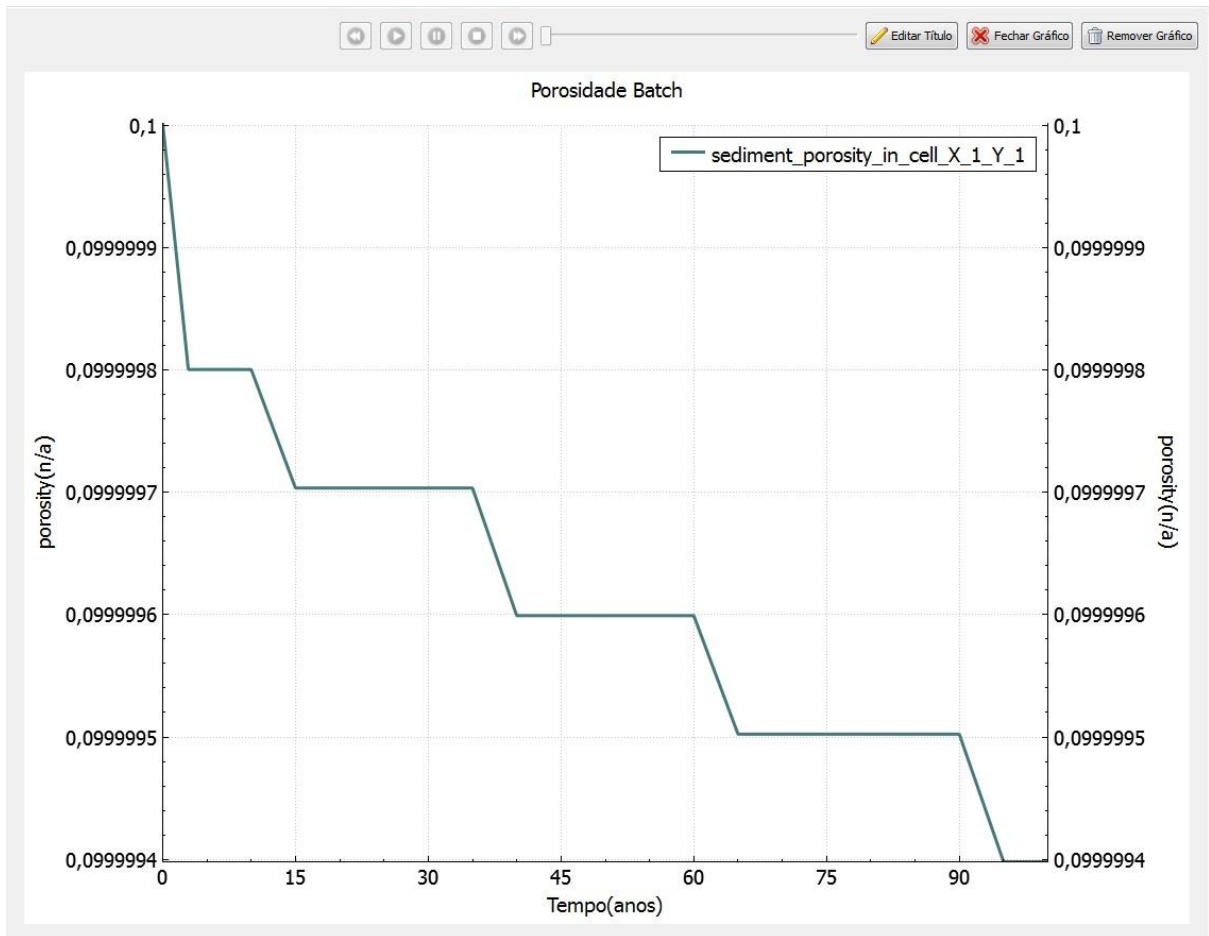


Figura 5.2: Gráfico da porosidade da simulação batch, mostrando que a porosidade diminuiu, mas em uma escala muito pequena

Na Figura 5.3 observamos a taxa de mudança de porosidade causada pela combinação de todos os minerais envolvidos nas reações diagenéticas gerando modificações na rocha causando porosidade.

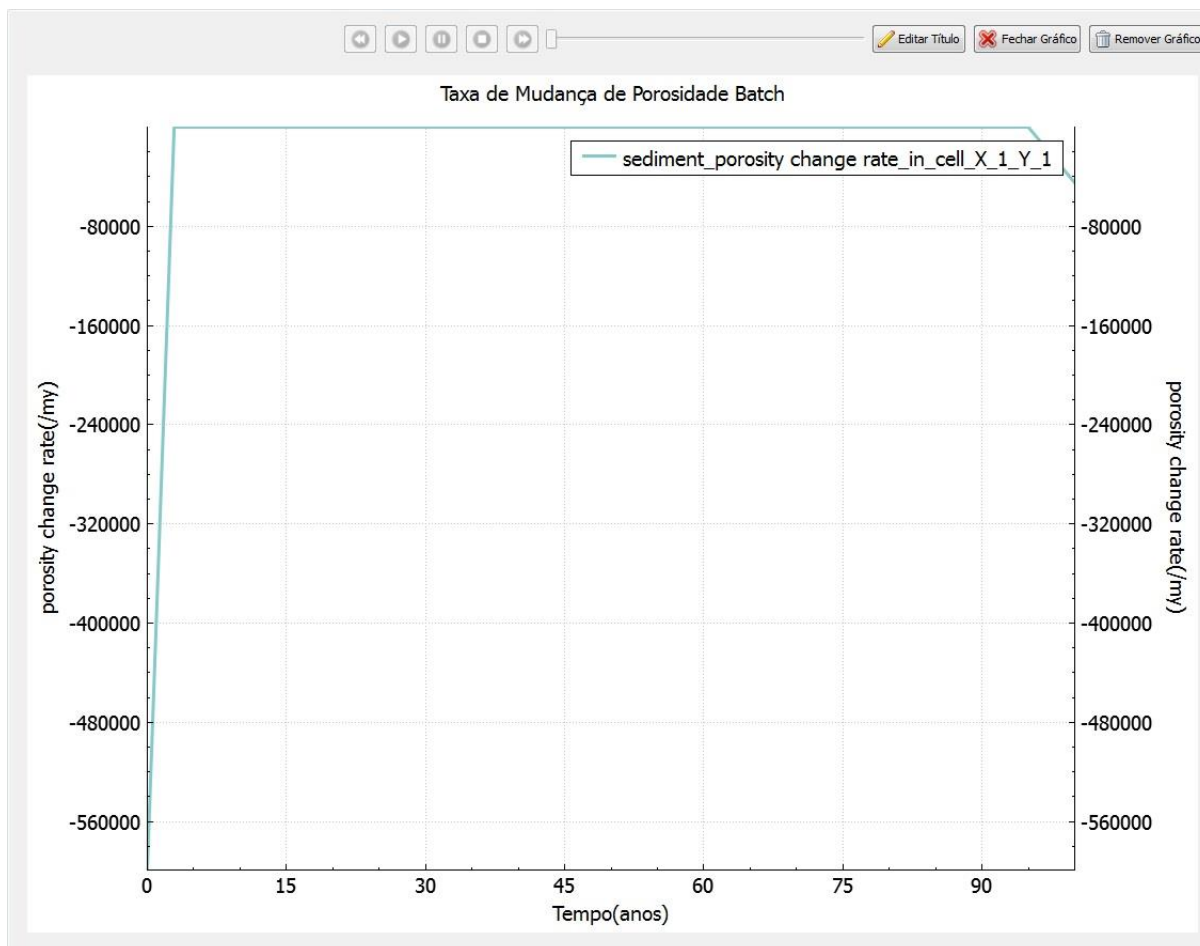


Figura 5.3: Gráfico da taxa de mudança de porosidade da simulação batch

Já a figura 5.4 nos mostra que, no início das simulações (em torno de 4 anos), os minerais estão em desequilíbrio com a água existente no interior da rocha. À medida que o tempo vai evoluindo estes minerais alcançam um estado estacionário e uma estabilidade das fases minerais. É possível observar este comportamento quando plotamos o Índice de Saturação dos minerais versus tempo de simulação. Esta informação é de suma importância, pois sabemos se o mineral está dissolvido ou precipitado na formação geológica.

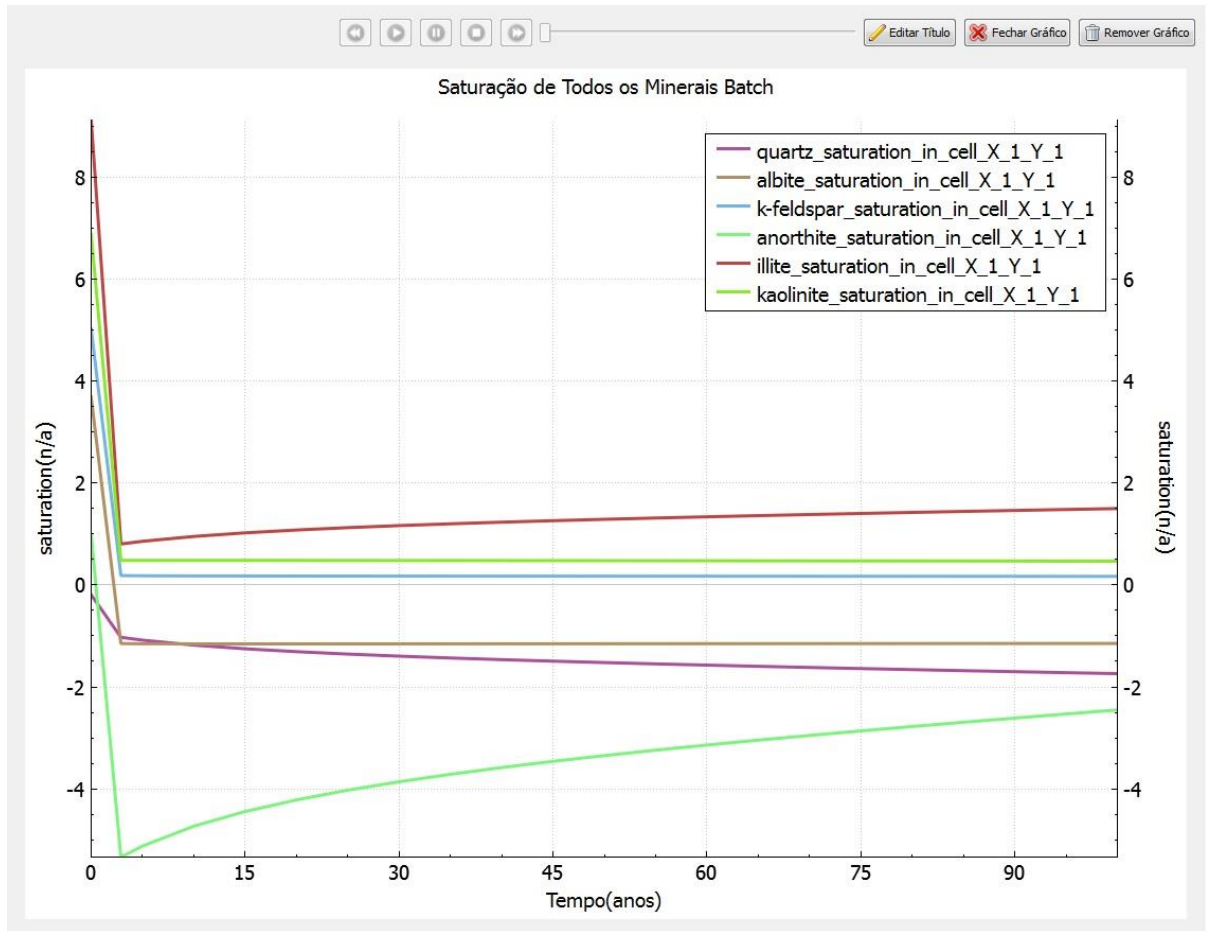


Figura 5.4: Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação batch

Conforme revelado pelo Índice de Saturação, os minerais podem aumentar (precipitar) ou diminuir (dissolver) o seu volume. Conforme a Figura 5.5 cada mineral possui uma quantidade volumétrica referente à litologia presente na rocha. Já a fração de volume, frequentemente, tem valores numéricos pequenos ( $10^{-7}$ ) (Figura 5.6) devido à baixa reatividade e baixa energia cinética, decorrentes das baixas temperaturas de simulação.



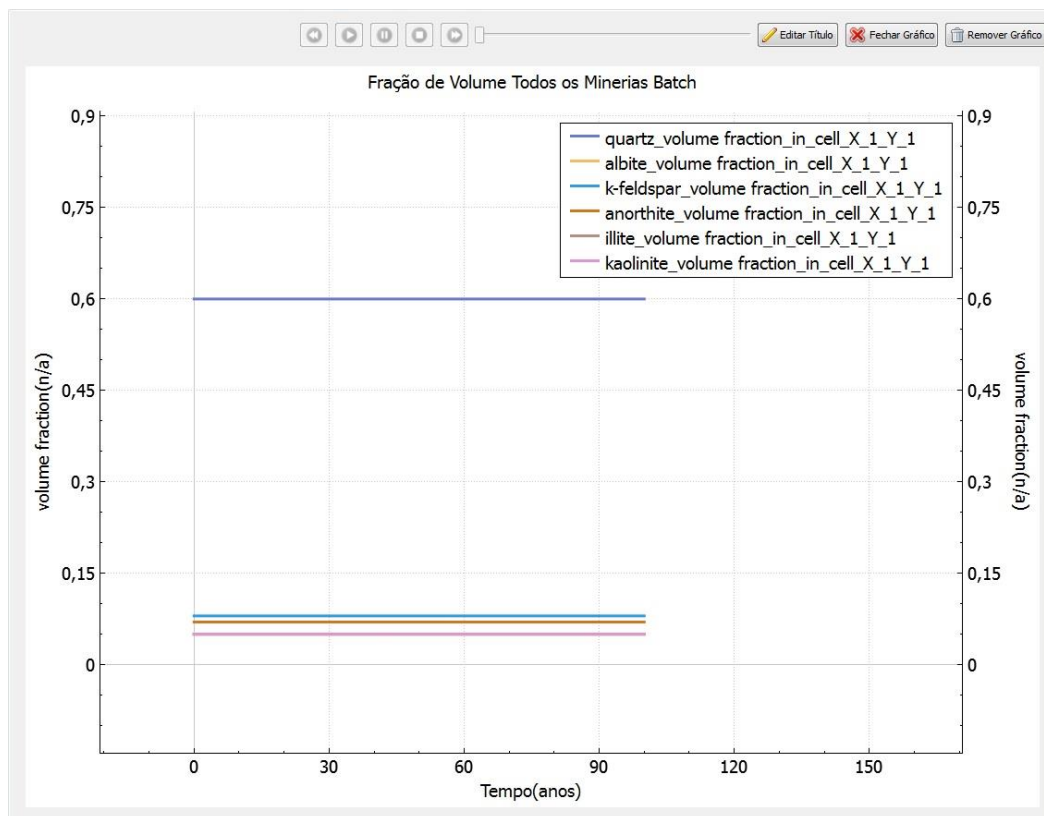


Figura 5.5: Gráfico da fração de volume de todos os minerais presentes na simulação batch

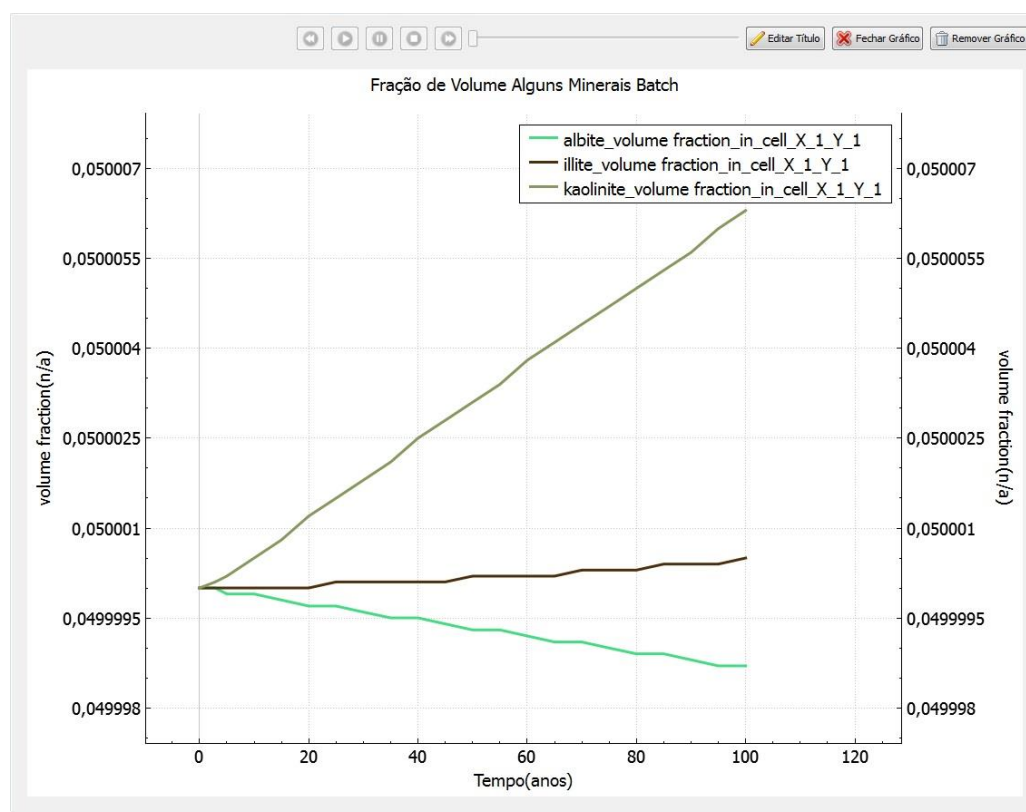


Figura 5.6: Gráfico da fração de volume de alguns minerais presentes na simulação batch, mostrando que há variação de fração de volume, mas em uma escala muito pequena

## 5.2 Simulação 1D

As simulações em 1D permitem o usuário prever a evolução de uma água dentro de uma rocha reservatório. Entende-se rocha reservatório pela acumulação de água, óleo ou gás retido nos espaços vazios (poros) de uma formação rochosa. Assim como nas simulações em Batch, foi utilizado o Índice de Saturação. Na Figura 5.7 observamos que minerais estão precipitados (índice de saturação positivo) e outros estão dissolvidos (índice de saturação negativo).

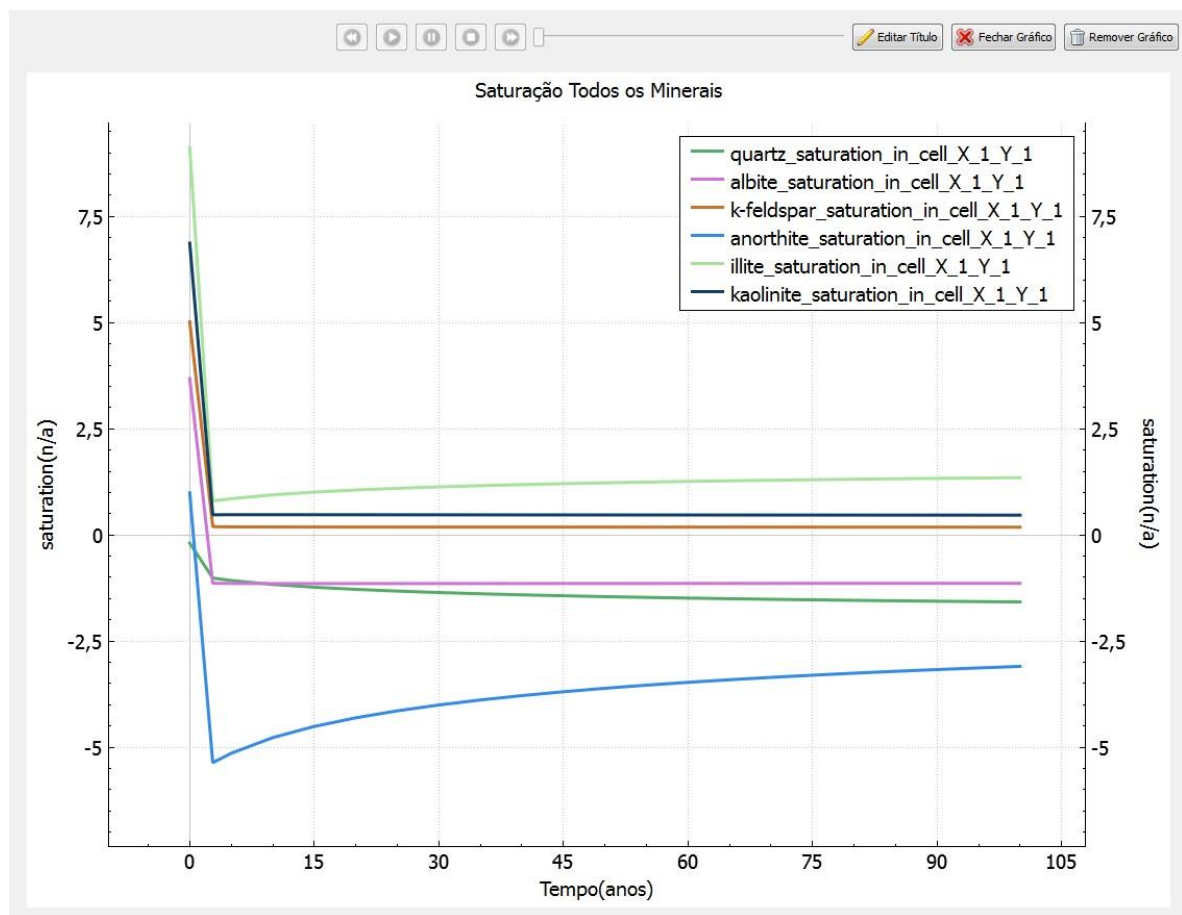


Figura 5.7: Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação 1D em relação ao tempo

Outro ponto importantes das simulações em 1D é a possibilidade de plotarmos Índice de Saturação versus distância (Figura 5.8). Isso nos revela o caráter reacional do meio geológico na própria rocha. Conforme observado na Figura 5.8, quando a água atingir uma distância de aproximadamente 50m dentro da formação rochosa, ocorre uma mudança nas fases minerais, reveladas pelo Índice de Saturação. Isto evidencia uma mudança de litologia,

pois este novo sistema reacional, a partir dos 50m, é mais reativo conduzindo a novas reações e uma nova fase mineral existente.

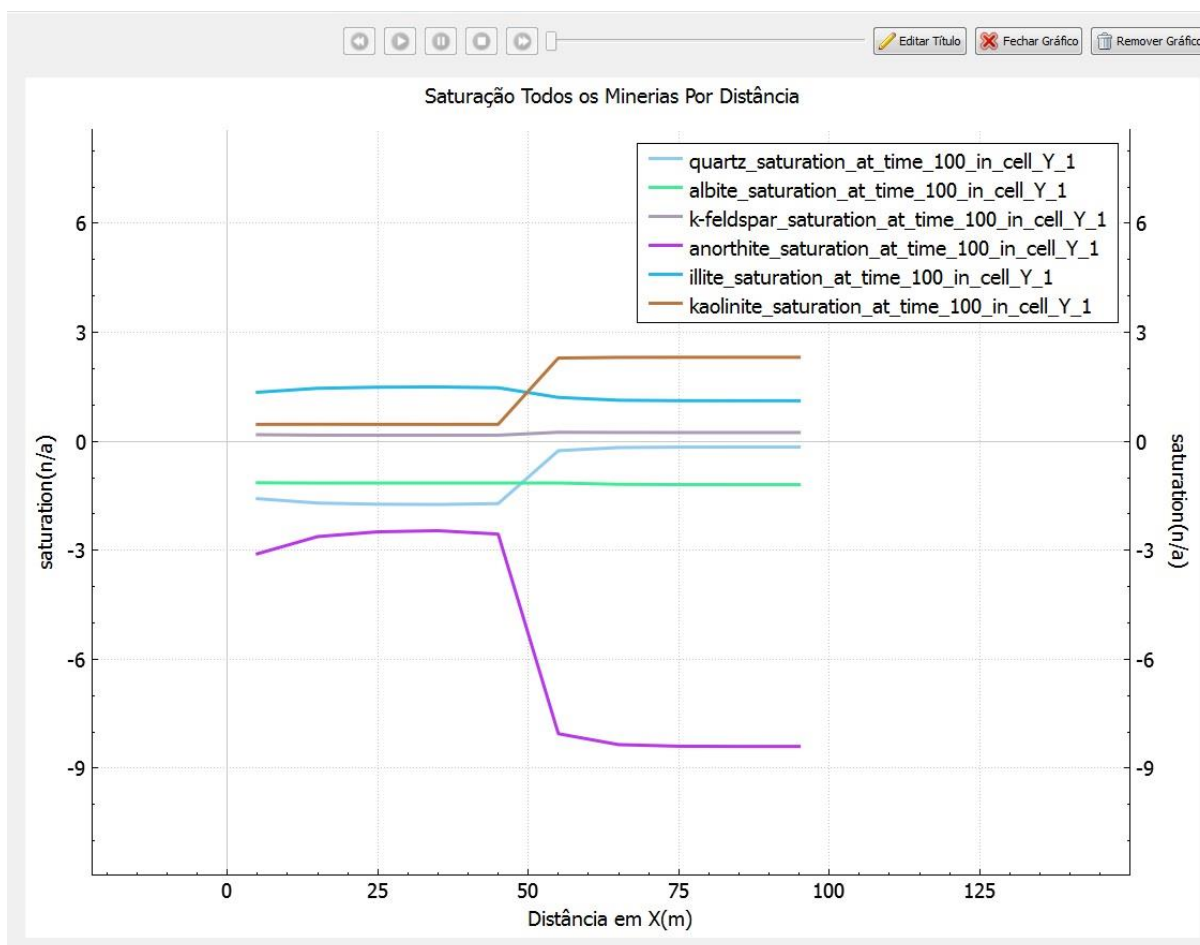


Figura 5.8: Gráfico do índice de saturação de todos os minerais presentes na simulação 1D em relação à distância

Outra forma de visualização dos dados é plotar o Índice de Saturação de minerais versus tempo e o espaço. Na Figura 5.9 está representado o Índice de Saturação do quartzo durante 100 anos de interação água-rocha em um meio geológico de 100 metros de comprimento. Observamos uma diminuição do Índice de Saturação (provável dissolução do mineral) devido às reações diagenéticas no meio geológico.

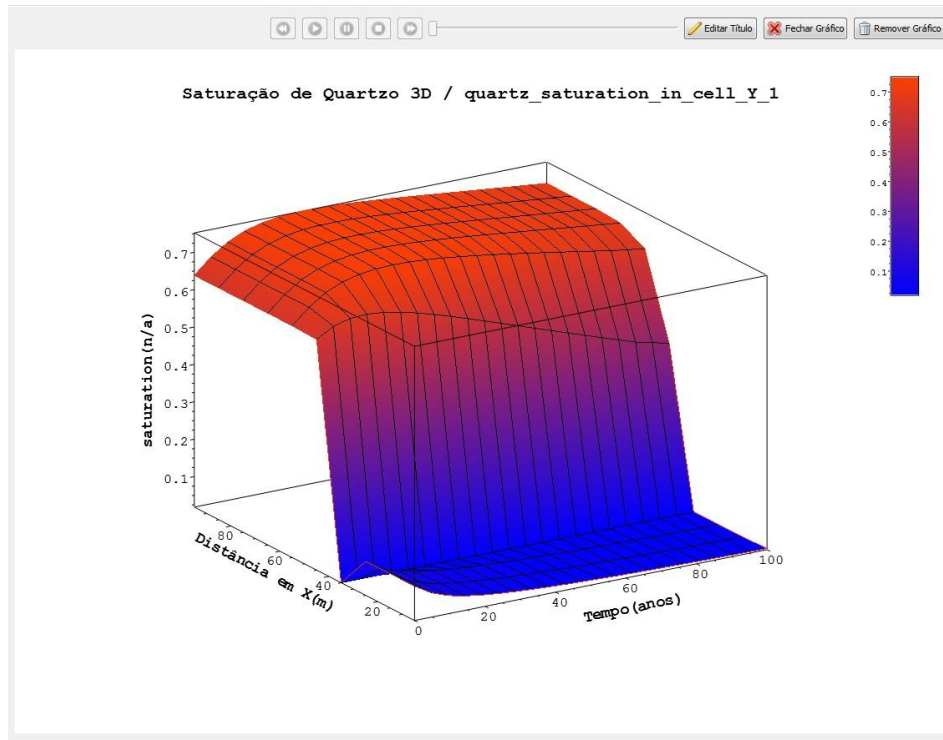


Figura 5.9: Gráfico 3D do índice de saturação do quartzo em relação ao tempo e à distância na simulação 1D

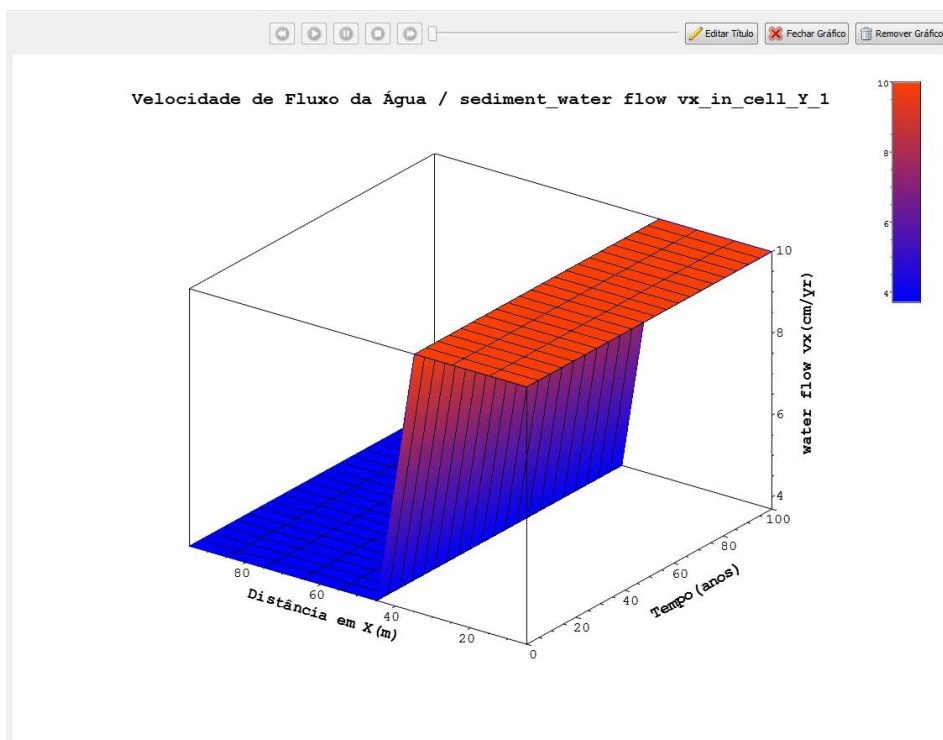


Figura 5.10: Gráfico 3D da velocidade de fluxo da água em relação ao tempo e à distância na simulação 1D

A Figura 5.10 nos mostra a mudança de fluxo quando a água encontra uma nova litologia. Este aumento de fluxo está relacionado com o tamanho dos grãos que possibilita uma menor resistência na passagem da água. Esta mudança abrupta de fluxo é característica de grãos maiores, quando comparados com a primeira litologia, onde a água fluía com uma taxa de aproximadamente 4cm/ano.

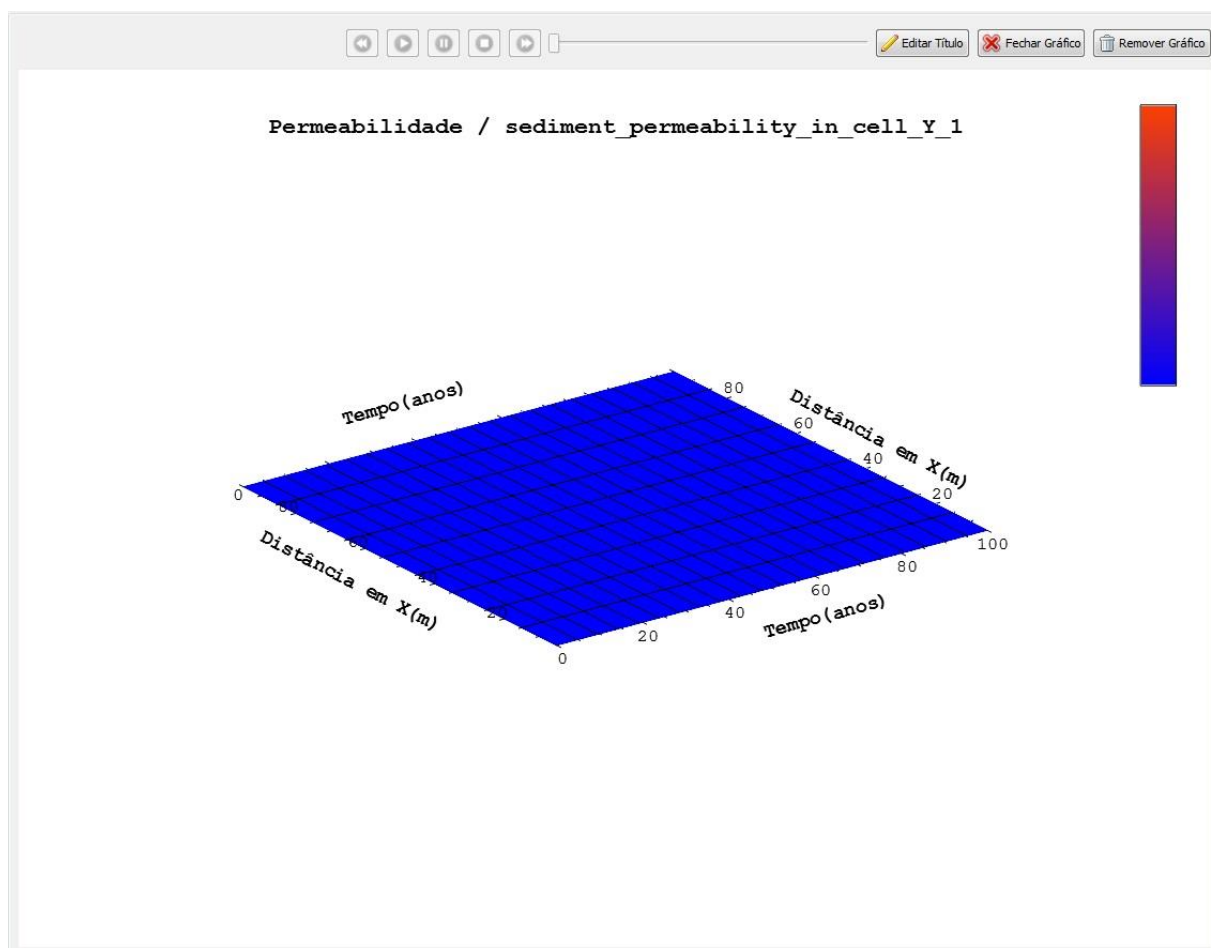


Figura 5.11: Gráfico 3D da permeabilidade do domínio de simulação em relação ao tempo e à distância, nesse caso, a permeabilidade está em zero

Uma vez determinada a taxa de porosidade de uma rocha reservatório, é possível calcularmos a permeabilidade do meio. Isso se refere à interconectividade dos poros da rocha. Na Figura 5.11 observamos que a permeabilidade da rocha é zero, ou seja, não há conexão de um poro para outro. Não existem canais interligando os poros e uma consequência direta deste comportamento é a baixa qualidade da rocha reservatório, pois não possuindo conectividade entre os poros fica praticamente inviável a utilização desta formação rochosa para prospecção de petróleo, por exemplo.

### 5.3 Simulação 2D

A dolomitização é um fenômeno natural através do qual o calcário, ou carbonato de cálcio ( $\text{CaCO}_3$ ), é transformado em  $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$  ou dolomita.

A água do mar, que é naturalmente rica em magnésio (Mg), mistura-se com o carbonato de cálcio, reduzindo a composição de cálcio em até 50%. Para se tornar dolomita, o calcário tem que passar por este processo várias vezes ou durante um período longo de tempo. A responsável pelo processo de dolomitização é a circulação de água carregada de sais magnesianos. Quando chega o ponto em que o calcário está muito enriquecido em carbonato de magnésio, ele passa a constituir um calcário dolomítico, ou simplesmente dolomita. As Figuras 5.12 a 5.16 representam este aumento na fração de volume de dolomita.

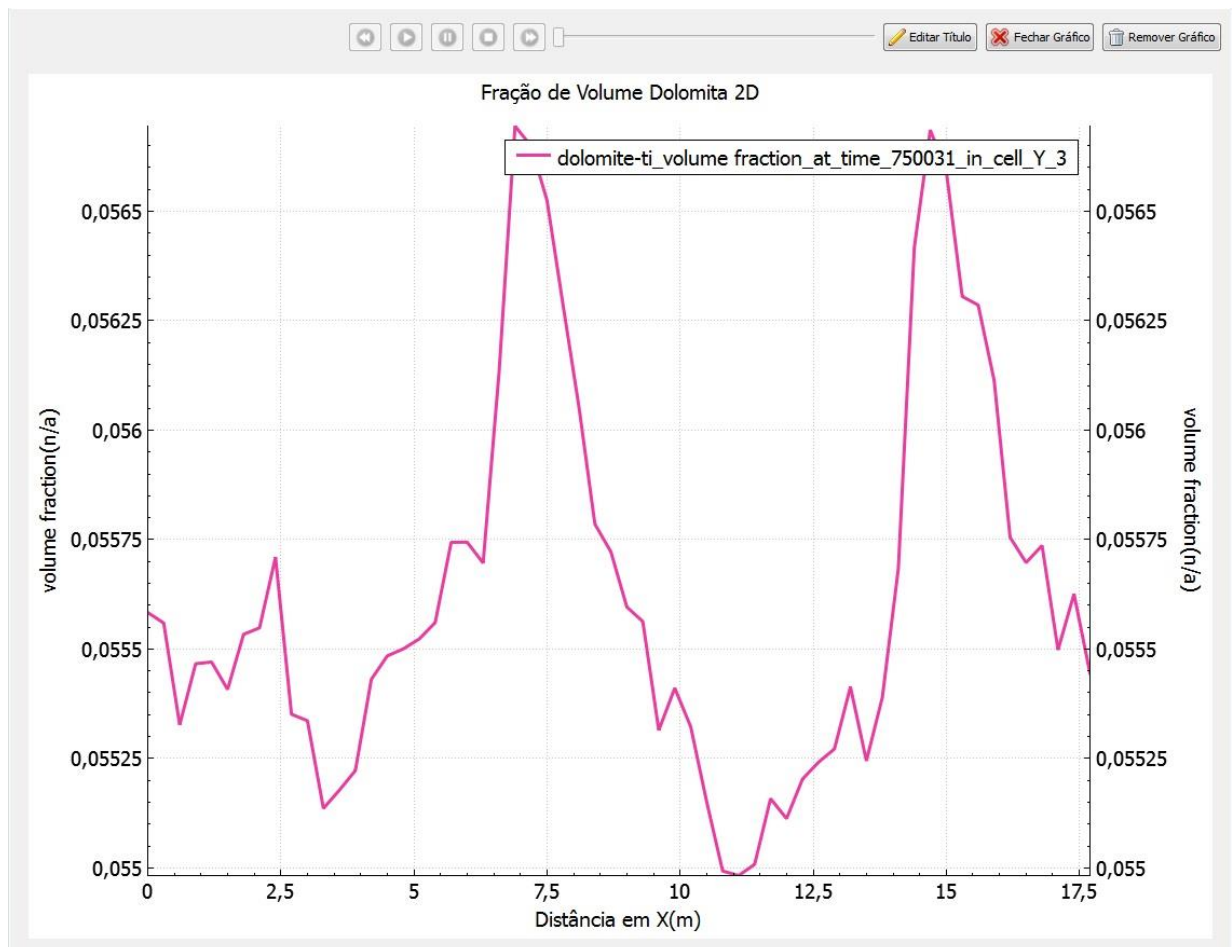


Figura 5.12: Gráfico da fração de volume da dolomita em relação à distância em um dos sentidos em um determinado tempo de simulação e em uma coluna de células.

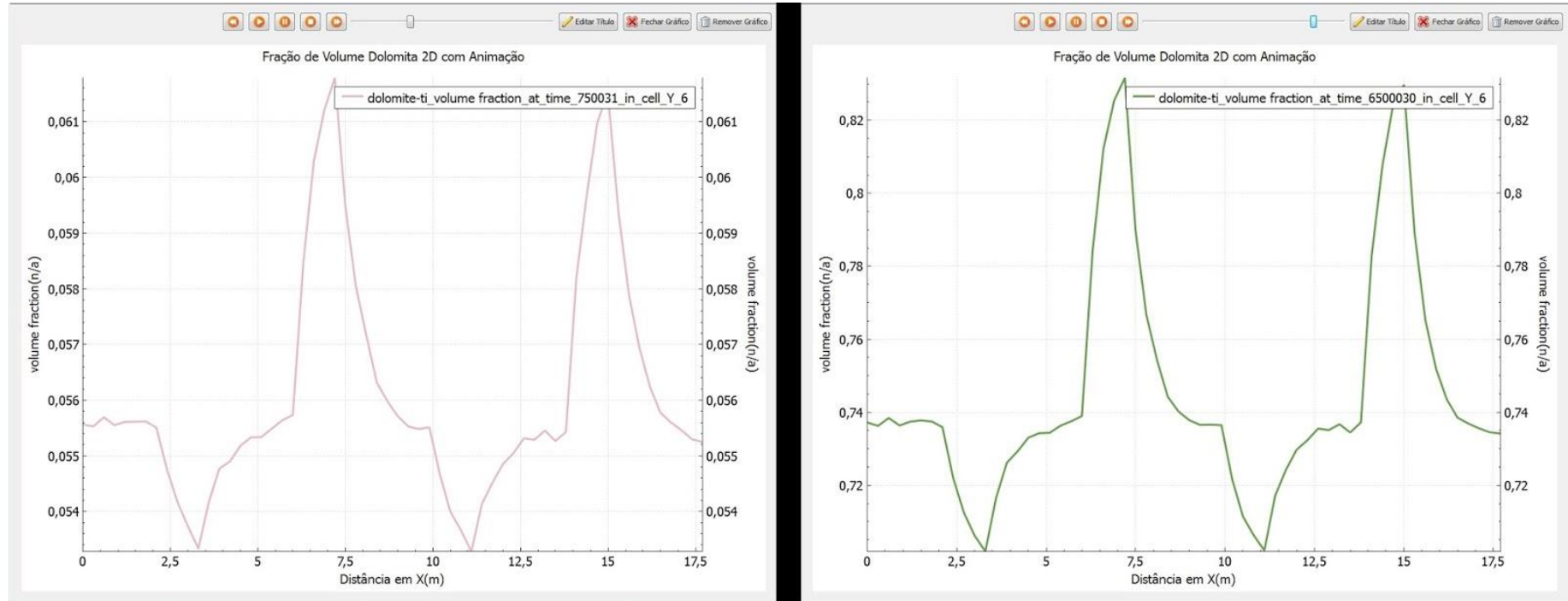


Figura 5.13: Gráficos de fração de volume da dolomita em dois tempos de simulação em relação à distância em um dos sentidos, mostrando o uso da animação



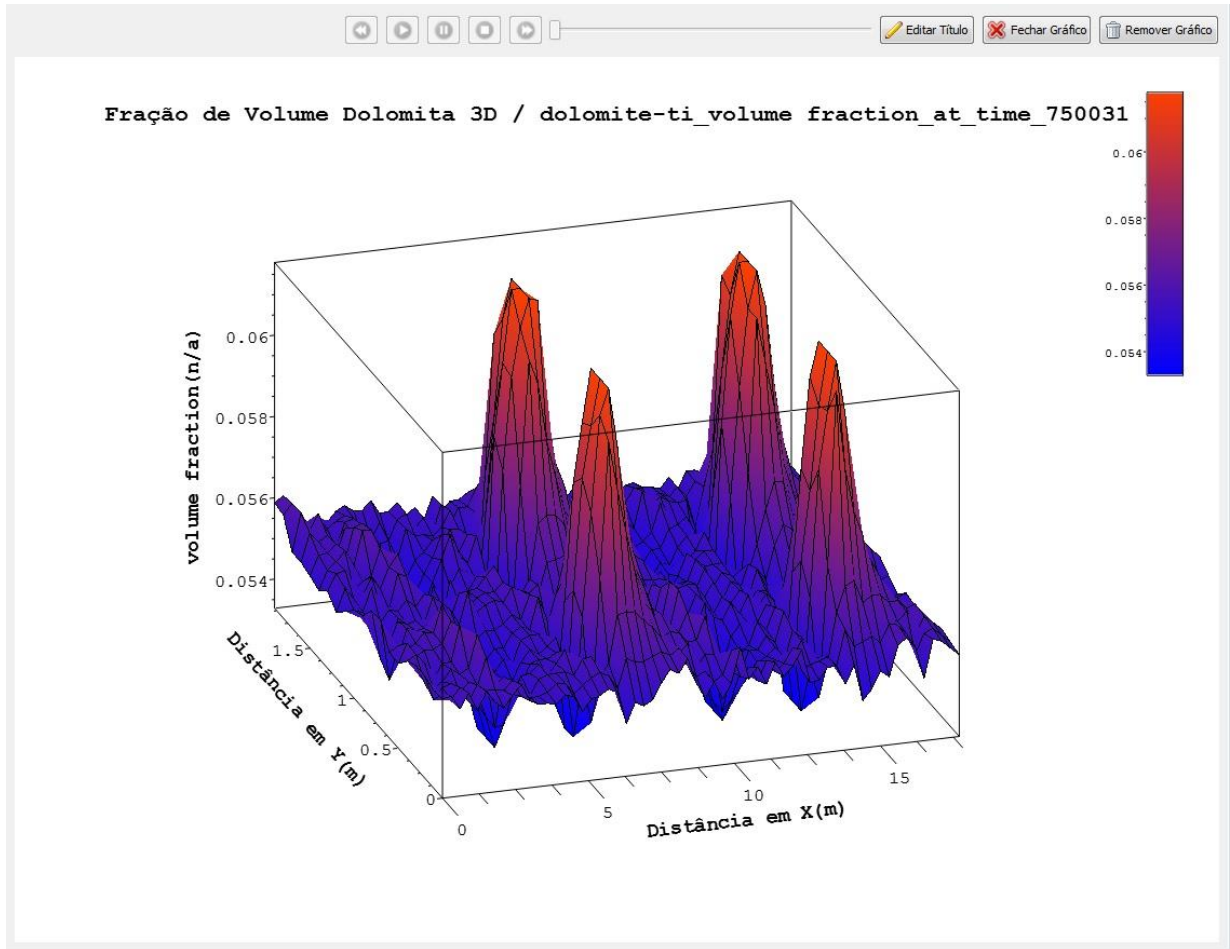


Figura 5.14: Gráfico 3D da fração de volume de dolomita em relação à distância nos dois sentidos em um tempo de simulação

Como o volume dos cristais de dolomita é 13% menor do que o da calcita, o processo de dolomitização é acompanhado por um aumento da porosidade e permeabilidade das rochas (Figura 5.17).

A dolomitização tanto pode ocorrer em ambiente de sedimentação raso em condições de clima árido como devido à diagênese em ambiente de alta profundidade de soterramento.



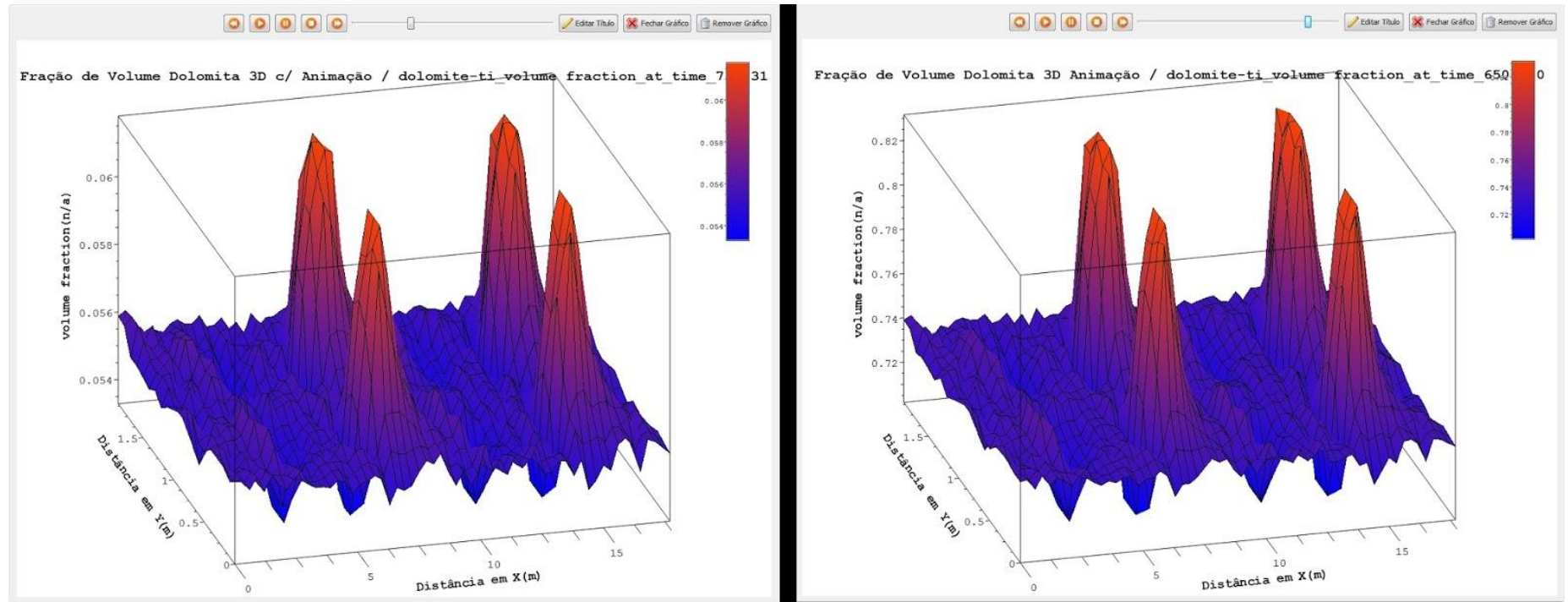


Figura 5.15: Gráficos 3D da fração de volume de dolomita em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação

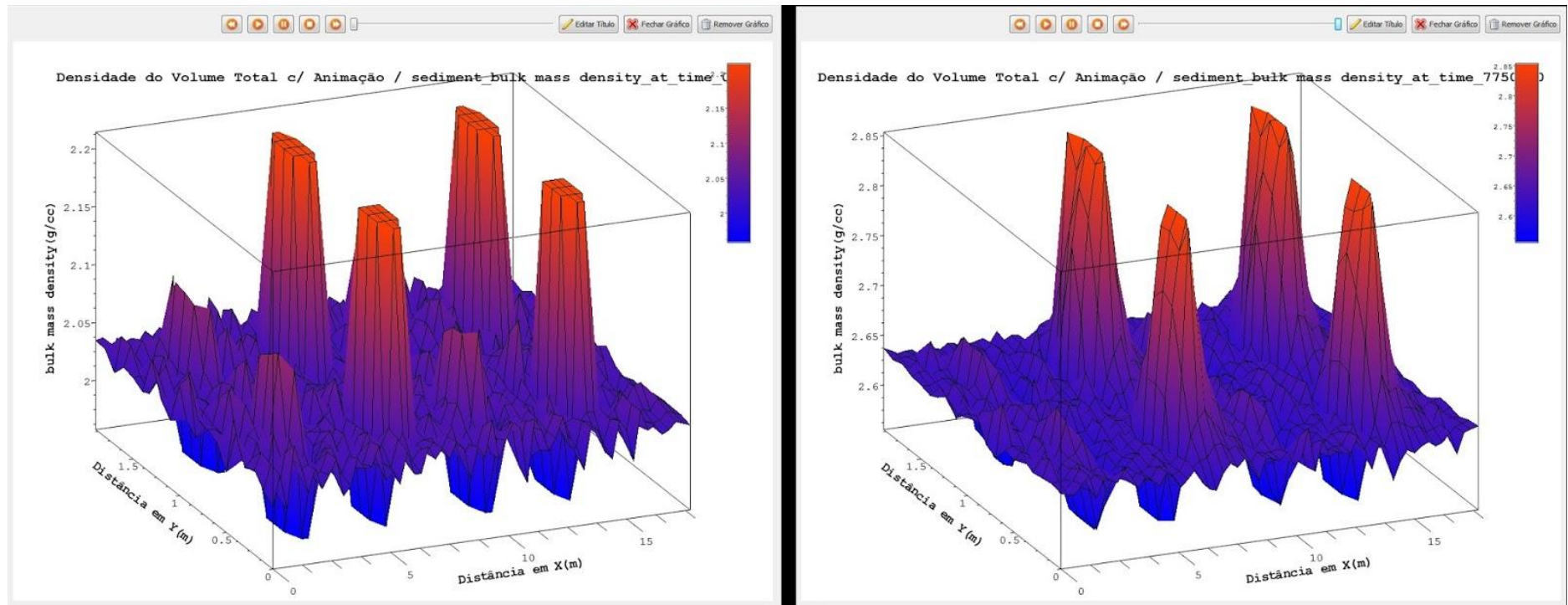


Figura 5.16: Gráficos 3D da densidade do volume total do domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação

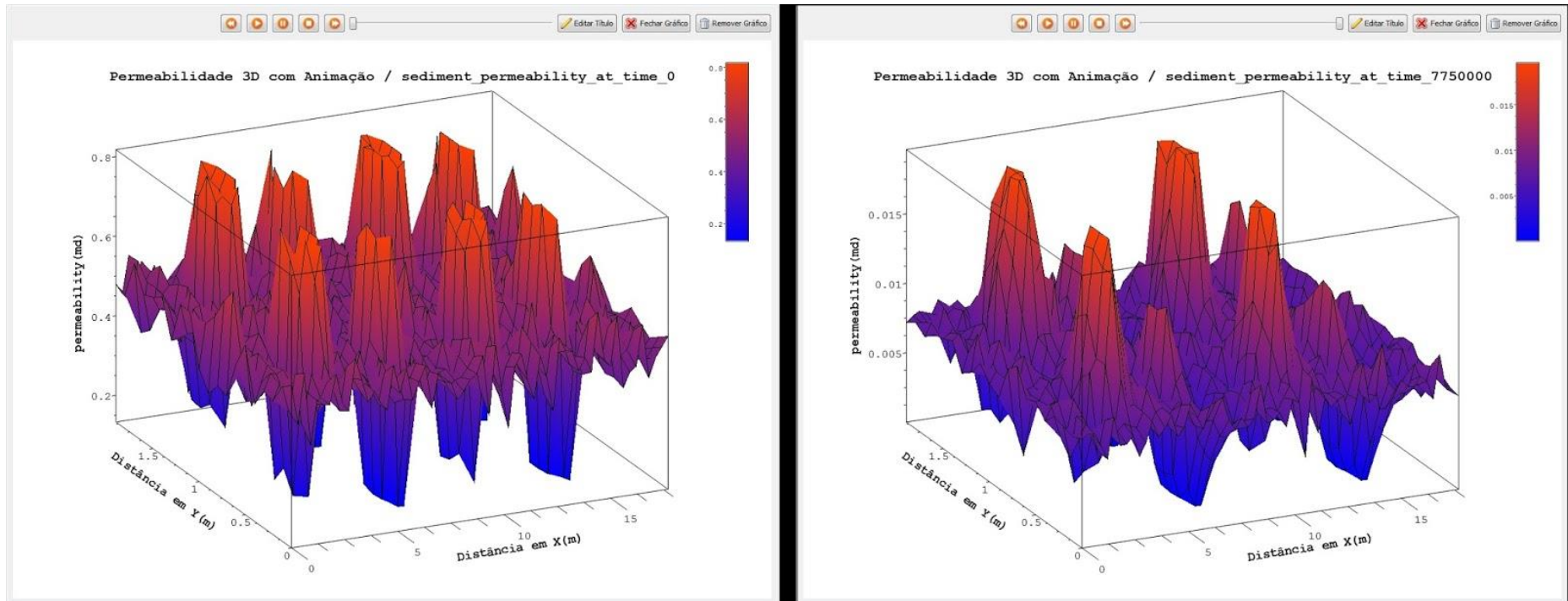


Figura 5.17: Gráficos 3D da permeabilidade do domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação.

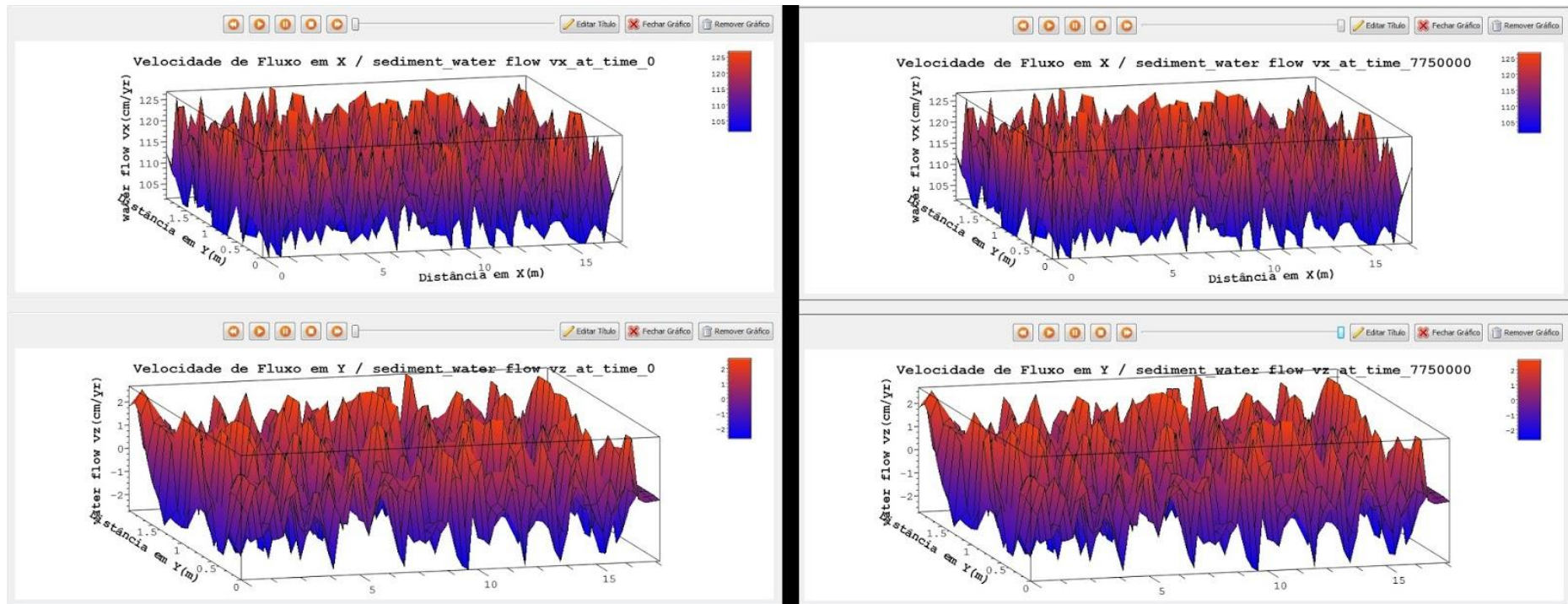


Figura 5.18: Gráficos 3D da velocidade de fluxo em cada sentido no domínio de simulação em relação à distância nos dois sentidos em dois tempos de simulação, mostrando o uso da animação.

Conforme a Figura 5.18 observamos uma velocidade de fluxo constante durante a dolomitização à medida que o tempo de simulação alcança aproximadamente 8 milhões de anos. Uma vez que o processo de dolomitização se inicia, as reações diagenéticas alcançam o equilíbrio químico e em consequência o sistema torna-se estável.

## 6 DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Para a visualização de dados escalares de simulações Batch, 1D e 2D, as técnicas de visualização implementadas mostram-se suficientes para a compreensão dos dados de simulações de processos diagenéticos. São mais flexíveis que as técnicas implementadas por outros softwares, assim cumprindo com a definição de Chen et al. (2013).

Entretanto, o trabalho ainda pode ser ampliado em alguns aspectos.

Um aspecto é que, como pode ser notado na Figura 5.18, podemos visualizar dados escalares da velocidade de fluxo da água, mas não podemos visualizar a direção desse fluxo com as técnicas implementadas. Para isso, é necessário implementar técnicas de visualização vetorial para que o usuário possa analisar como o fluxo de água muda de acordo com o tempo.

Um outro aspecto é a falta de reprodução do domínio criado pelo usuário na etapa de entrada de dados. Essa visualização da disposição do domínio pode trazer uma compreensão de alguns comportamentos da simulação, porque se ele é vertical, o comportamento de cada célula pode ser diferente, devido a mudanças de pressão e temperatura, que são fatores que controlam o processo da diagênese.

Uma dificuldade encontrada no trabalho foi encontrar bibliotecas de visualização de dados que suprissem todas as necessidades do trabalho. As bibliotecas encontradas possuem limitações, como, por exemplo, a QtPlot3D: a existência de uma seleção para fazer um corte transversal no gráfico facilitaria a visualização de partes do gráfico 3D.

Outra limitação de biblioteca encontrada foi na QCustomPlot, que não possui implementação de seleção de uma região de interesse no gráfico para analisar mudanças bruscas, como no gráfico da Figura 5.7. Apesar dessas dificuldades, a interface de seleção de variáveis apresenta opções para suprir essas deficiências.



## REFERÊNCIAS

- CARD, S. et al. Readings in Information Visualization: Using Vision to Think, Morgan Kaufmann Publishers. 1999.
- TELEA, A.C. Data Visualization, Principles and Practice, A K Peters. 2008.
- CHEN, M. et al. What is Visualization Really for? CoRR. 2013.
- DE ROS, L.F. Composition controls on sandstones diagenesis: compr. summ. Uppsala Diss. Facul. Sci. Tech. 198:1-24. 1996.
- PARKHURST, D.L.; APPELO, C.A.J. User's guide to PHREEQC (Version2) — A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations: U.S.Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4259, 310 p. 1999.
- XU, T. et al. TOUGHREACT User's Guide: A Simulation Program for Nonisothermal Multiphase Reactive Geochemical Transport in Variably Saturated Geologic Media. 206p. 2004.
- The Geochemist's Workbench, Aqueous Solutions LLC. Disponível em: <<http://www.gwb.com/>>. Acesso em: 15 de Outubro de 2014.
- BOUDREAU, B.P. A Method-of-lines code for carbon and nutrient diagenesis in aquatic sediments. Computers & Geosciences, Great Britain, Vol. 22, No. 5, p 479-496. 1996.
- PARK, A.J.; ORTOLEVA, P.J. WRIS.TEQ: multi-mineralic water-rock interaction, mass-transfer and textural dynamics simulator. Computers & Geosciences, Vol. 29, pp 277-290. 2003.
- NORDSTROM D.K. On the evaluation and application of geochemical models, Appendix 2 in Proceedings of the 5th CEC Natural Analogue Working Group and Alligator Rivers Analogue Project, an international workshop held in Toledo, Spain, October 5-19, 1992, EUR 15176 EN, pp. 375-385. 1994.
- PLUMMER, L. N. Geochemical modeling: A comparison of forward and inverse methods. In: Canadian/American Conference on Hydrogeology: Pratical Applications of Ground Water Geochemistry, Banff, Alberta, Canada, 1984.
- SUJKOWSKI, Z.B.L. "Diagenesis," Bulletin of the American Association of Petroleum Geologists 42, no. 11. 1958.
- WORDEN, R.H.; BURLEY, S.D. "Sandstone Diagenesis: The Evolution of Sand to Stone," in Burley SD and Worden RH (eds): Sandstone Diagenesis: Recent and Ancient. Malden, Massachusetts, USA: Wiley-Blackwall Publishing, International Association of Sedimentologist Reprint Series, vol. 4: 3-44. 2003.

BETHKE C. M. *GWB Reaction Modeling Guide– A User’s Guide to React and Gtplot*, University of Illinois, 74p. 2008.

PETRASIM 5. Thunderhead Engineering Consultants. 403 Poyntz Avenue, Manhattan, Kansas 66502-6081, United States. Disponível em: <<http://www.thunderheadeng.com/petrasim/>>. Acesso em: 17 de Outubro de 2014.

PRUESS, K. et al., *TOUGH2 User's Guide*, Version 2.0, Report LBNL-43134, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, Calif., 1999.

ALI, S.A. et al. *Diagenesis and Reservoir Quality*. *Oilfield Review Summer*: ed. 22, no. 2. 2010.

QCustomPlot. Disponível em: <<http://www.qcustomplot.com/>>. Acesso em: 8 de Abril de 2014.

QwtPlot3D. Disponível em: <<http://qwtplot3d.sourceforge.net/>>. Acesso em: 25 de Agosto de 2014.

MUNZNER, T. *Visualization Analysis and Design*. A K Peters Visualization Series. CRC Press. 2014.

BACCAR M.B.; FRITZ B. *Geochemical modelling of sandstone diagenesis and its consequences on the evolution of porosity*. *Applied Geochemistry*, Vol, 8, pp. 285-295, 1993.

MORAD S. et al. *Albitization of detrital plagioclase in triassic reservoir sandstones from the snorre field, norwegian north sea*. *J. Sediment. Petrol.* 60,411-425. 1990.

MAZZULO, S.J. *Overview of Porosity Evolution in Carbonate Reservoirs*. *Search and Discovery Article #40134*. 2004. Disponível em: <<http://www.searchanddiscovery.com/documents/2004/mazzullo/index.htm>>. Acesso em: 4 de Junho de 2014.

PARKHURST, D.L.; PLUMMER, L.N. *Geochemical models*. In: ALLEY, W.M. *Regional ground-water quality*. New York: Van Nostrand Reinhold, p. 199-225. 1993.



## GLOSSÁRIO

**DEPOSIÇÃO** – Processo sedimentar que consiste na acumulação de matéria mineral ou orgânica, transportada pela água, vento ou gelo.

**LITIFICAÇÃO** – Conjunto de processos que convertem sedimentos em rochas consolidadas devido, principalmente, pela pressão exercida pelos sedimentos acumulados nos diversos tipos de erosão.

**METAMORFISMO** – Conjunto de processos geológicos que levam à formação de rochas metamórficas. Esses processos envolvem transformações físicas e químicas sofridas pelas rochas, quando submetidas ao calor e à pressão do interior da Terra.