



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GEODINÂMICA E
GEOFÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PARA ESTIMATIVA DA PERMEABILIDADE UTILIZANDO DADOS DE RMN DE ROCHAS ANÁLOGAS A RESERVATÓRIO

Autor:

MAURÍCIO GABRIEL LACERDA MAFRA

Orientador:

PROF. DR. MILTON MORAIS XAVIER JUNIOR

Dissertação - 294 /PPGG

Agosto de 2024

Natal/RN, Brasil

MAURÍCIO GABRIEL LACERDA MAFRA

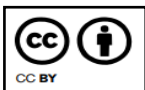
**APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PARA ESTIMATIVA DA
PERMEABILIDADE UTILIZANDO DADOS DE RMN DE ROCHAS ANÁLOGAS A
RESERVATÓRIO**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Geodinâmica e Geofísica (PPGG) da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Geodinâmica E Geofísica.

Orientador: Prof. Dr. MILTON MORAIS XAVIER JUNIOR.

NATAL

2024



Esta obra está licenciada com uma licença Creative Commons Atribuição 4.0 Internacional. Permite que outros distribuam, remixem, adaptem e desenvolvam seu trabalho, mesmo comercialmente, desde que creditem a você pela criação original. Link dessa licença: creativecommons.org/licenses/by/4.0/legalcode

MAURÍCIO GABRIEL LACERDA MAFRA

**APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PARA ESTIMATIVA DA
PERMEABILIDADE UTILIZANDO DADOS DE RMN DE ROCHAS ANÁLOGAS A
RESERVATÓRIO**

Defesa de Dissertação apresentada em 21 de Agosto de 2024 ao Programa de Pós-Graduação em Geodinâmica e Geofísica (PPGG) da Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN) como requisito à obtenção do Título de Mestre em Geodinâmica e Geofísica, Área de Concentração Geodinâmica

BANCA EXAMINADORA:

PROF. DR. MILTON MORAIS XAVIER JUNIOR
Presidente e orientador (PPGG-UFRN)

DR. ANDRE ALVES DE SOUZA
Membro Externo

PROF. DR. MANILO SOARES MARQUES
Membro interno (DGEF-UFRN)

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN

Sistema de Bibliotecas - SISBI

Catálogo de Publicação na Fonte. UFRN - Biblioteca Setorial Prof. Ronaldo Xavier de Arruda - CCET

Mafra,	Maurício	Gabriel	Lacerda.
Aplicação de aprendizado de máquina para estimativa da permeabilidade utilizando dados de RMN de rochas análogas a reservatório / Maurício Gabriel Lacerda Mafra. - 2024.			
90		f.:	il.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Centro de Ciências Exatas da Terra, Programa de Pós-graduação em Geodinâmica e Geofísica. Natal, RN, 2024.			
Orientação:	Milton	Morais	Xavier Junior.
1. Permeabilidade - Dissertação. 2. Porosidade - Dissertação.			
3. Carbonáticos - Dissertação. 4. Ressonância magnéticas -			

Dedico este trabalho a duas musas, uma que veio e outra que partiu deste mundo durante o curso desse mestrado. A musa que veio ao mundo Maria Clara Ferreira Mafra, minha filha, e a musa que me deixou Terezinha Alves da Costa, minha bisavó. Obrigado por todos os ensinamentos.

AGRADECIMENTOS

Esta dissertação de mestrado não poderia ter sido desenvolvida sem o apoio de várias pessoas.

Em primeiro lugar à Deus Pai, e de Jesus e do Espírito Santo que nos deu o dom da ciência, da verdade e do ânimo para compreendermos a criação em seus mínimos detalhes.

Agradeço em mais alto grau à minha família, minha esposa Mayara e minha filha Maria Clara, que me força a dar sempre o melhor das minhas faculdades para vivermos em harmonia.

Desejo igualmente agradecer aos meus parentes, meus pais Misa e Marcelo, meu irmão Marcelo Filho e sua família Ana e Theo, meus avós Maria e Djalma, minha sogra Marly e sua tia Francisca, minha tia Julianny e sua família, e por minha falecida bisavó Terezinha que nos deixou enquanto eu escrevia essas páginas. Por eles vim ao mundo e me criei.

Agradeço ao meu amigo Thiago, que verdadeiramente me auxiliou, dia a dia, nessa empreitada do mestrado, pelas discussões, aprendizados, alegrias e frustrações do avanço científico. Esse avanço não poderia ter acontecido sem a liberdade que nosso orientador, professor Milton, nos deu, meus agradecimentos sinceros pela sua orientação genuína e afeição à ciência.

Aos meus amigos de adolescência Mauro, Samuel, Pedro, Victor, Matheus e Danilo meus sinceros reconhecimentos pelas ajudas sociais.

Agradeço também aos funcionários que estão diariamente comigo e me ajudam em atividades corriqueiras, em especial a Geraldo e Sr. João.

Agradeço aos programas que efetivamente me ajudaram a realizar este trabalho. Ao Programa de Pós-graduação em Geodinâmica e Geofísica (PPGG) pela oportunidade de avançar nos conhecimentos petrofísicos. Igualmente a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de pesquisa. E ao Núcleo de Processamento de Alto Desempenho (NPAD) pela disponibilização de acesso aos seus serviços.

RESUMO

Esta dissertação de mestrado aborda a relevância dos estudos de rochas análogas aos reservatórios, dando maior foco no parâmetro petrofísico de permeabilidade. Técnicas petrofísicas tradicionais fornecem valores absolutos desse parâmetro, porém pouco informa os motivos que causam tais valores. Essa ausência de informações precisas levam a utilização de outras técnicas mais avançadas para uma análise sistemática dos reservatórios. Embora a Ressonância Magnética Nuclear demonstre eficácia na obtenção de informações avançadas sobre o reservatório, suas modelagens analíticas para obter a permeabilidade não possuem boa precisão, principalmente quando se trabalha com reservatórios heterogêneos, que demonstram, ainda, algumas limitações. Diante dessa lacuna, este estudo propõe aprimorar as previsões da permeabilidade, empregando os modelos de aprendizado de máquina *Random Forest*, *Gradient Boosting* e *Multi Layer Perceptron*. O objetivo é prever a permeabilidade a partir dos padrões obtidos através da Ressonância Magnética Nuclear, comparar com os modelos analíticos e observar qual modelo se adequa melhor ao reservatório. Foi observado que os modelos de aprendizado de máquina obtiveram melhores previsões em comparação aos modelos analíticos.

Palavras-chave: Permeabilidade; Porosidade; Carbonáticos; Ressonância Magnéticas; Aprendizado de Máquina.

ABSTRACT

This master's thesis explores the relevance of studies on rocks analogous to reservoirs, with a primary focus on the petrophysical permeability parameter. Traditional petrophysical techniques provide absolute values for this parameter but offer limited insights into the underlying reasons for these values. The absence of precise information necessitates the use of more advanced techniques for a systematic reservoir analysis. While Nuclear Magnetic Resonance proves effective in obtaining advanced reservoir information, its analytical models for permeability lack accuracy, particularly in heterogeneous reservoirs, revealing certain limitations. Filling this gap, this study aims to improve permeability predictions by employing machine learning models such as Random Forest, Gradient Boosting, and Multi-Layer Perceptron. The goal is to predict permeability based on patterns obtained through Nuclear Magnetic Resonance, compare them with analytical models, and identify the model that best suits the reservoir. It was observed that machine learning models provided more accurate predictions compared to analytical models.

Key-words: Permeability; Porosity; Carbonates; Magnetic Resonance; Machine Learning.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	14
1.1. Hipótese	15
1.2. Objetivos	16
1.3. Estrutura	17
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	18
2.1. Parâmetros petrofísicos	18
2.1.1. Porosidade	19
2.1.2. Permeabilidade	24
2.2. Reservatórios	28
2.3. Ressonância magnética nuclear	30
2.3.1. Entendimento da RMN através da física clássica	32
2.3.2. Relaxação magnética nuclear	41
2.4. Métodos de aquisição	43
2.5. Aplicações em meios porosos	47
2.6. Princípios computacionais	49
2.6.1. Transformada de Fourier	49
2.6.2. Transformada de Laplace	50
2.6.3. Regressão linear	52
2.7. Aprendizado de máquina	53
2.7.1. Ensemble	55
2.7.1.1. <i>Random Forest</i>	56
2.7.1.2. <i>Gradient Boosting</i>	60
2.7.2. Neural Network	61
3. MATERIAIS E MÉTODOS	63
3.1. Amostras carbonáticas e petrofísica básica	63

3.2.	Ressonância magnética nuclear.....	64
3.3.	Aprendizado de máquina.....	68
3.3.1.	Treinamento Supervisionado	68
3.3.2.	Hiperparâmetros de Treinamento	69
3.3.2.1.	<i>Técnica Ensemble</i>	70
3.3.2.2.	<i>Modelo de Perceptrons em Múltiplas Camadas</i>	71
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	73
5.	CONCLUSÕES	82
	REFERÊNCIAS.....	83
	APÊNDICE A - APPLYING MACHINE LEARNING TO PREDICT PERMEABILITY IN CARBONATE ROCKS USING NMR T2 RELAXATION DATA	88
	APÊNDICE B - CARACTERIZAÇÃO DE UNIDADES DE FLUXO E DETERMINAÇÃO DE TIPOS DE POROS COM DADOS DE RMN E APRENDIZADO DE MÁQUINA	90

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Tipos de porosidade primária e secundária.	20
Figura 2 - a) Seleção de grãos de diferentes tamanhos e formatos, b) seleção de grãos com três granulometrias diferentes, mas bem selecionados entre elas.	21
Figura 3 - Aumento da compactação com a profundidade afetando a porosidade.	23
Figura 4 - Sistema Cúbico e Romboédrico de empacotamento.	24
Figura 5 - Experimento laboratorial para medição da permeabilidade.	25
Figura 6 - Representação da Lei de Pousivelle's.	26
Figura 7 - Efeito da cimentação na permeabilidade.	27
Figura 8 - Representação de permeabilidade em série (a) e paralelo (b).	27
Figura 9 - Corrente elétrica em uma espira circular.	32
Figura 10 - Partícula de massa "m" com movimento rotacional ao redor de um eixo.	33
Figura 11 - Corpo com momento de spin.	33
Figura 12 - Corpo com movimentos de rotação e movimento orbital.	34
Figura 13 - Esfera com movimento orbital.	35
Figura 14 – Representação de a) uma partícula com movimento de spin representada por um vetor e que se assemelha a um ímã por possuir momento magnético, b) uma população aleatória de partículas com momentos magnéticos, resultando em uma magnetização líquida zero.	37
Figura 15 – Magnetização resultante a partir da aplicação de um campo transversal ao campo B_0	40
Figura 16 – Magnetização resultante M_z no eixo "z" a partir da aplicação de um campo externo (H) a) quando o campo é aplicado, b) quando o campo é desligado.	40
Figura 17 - Tipos de relaxações de um próton em ambiente poroso.	43
Figura 18 - a) Aquisição do sinal utilizando a sequência FID; b) Transformada de Fourier deste sinal FID.	44
Figura 19 - Aplicação de pulsos para obter o eco-spin em 2τ	44
Figura 20 - a) Sequência CPMG vista pela aplicação de pulsos; b) Sequência CPMG vista entre as medições completas; c) Comportamento dos spins durante a sequência CPMG.	46
Figura 21 - Sequência IR.	46
Figura 22 – Diferentes tamanhos de poros com água 100% saturada e seu respectivo tempo característico e tempo de relaxação. No final a composição dos tempos característicos de todos os poros e a curva de relaxação.	47

Figura 23 - Gráfico de dados aleatórios em uma função do segundo grau.....	56
Figura 24 - Árvores de decisão cirandas. a) Apenas um nó; b) Dois nós; c) Três nós.	57
Figura 25 - Respostas das árvores de decisão baseada em sua profundidade.....	59
Figura 26 - Respostas das florestas aleatórias baseadas em sua profundidade máxima.....	60
Figura 27 - Respostas dos Gradientes baseadas em sua quantidade de estimadores.	61
Figura 28 - Respostas das Redes Neurais com quantidades de TLU em cada camada.	62
Figura 29 - Representação modelo de seleção.....	64
Figura 30 - Parâmetros escolhidos pelo autor para aquisição dos dados.	66
Figura 31 - Intervalos de proporções dos tamanhos de poros a partir de uma curva de distribuição T_2	67
Figura 32 – Fluxo de trabalho para avaliação do melhor modelo de permeabilidade.	68
Figura 33 - Ajuste da porosidade medida por gás e por RMN com dados de a) Treinamento e b) Teste.....	73
Figura 34 - Previsão de permeabilidade a partir dos modelos empíricos a) SDR treinamento, b) SDR teste, c) Han treinamento e d) Han teste.....	74
Figura 35 - Previsão de permeabilidade a partir dos modelos de aprendizado de máquina: a) RFR Treinamento, b) RFR Teste, c) GBR Treinamento, d) GBR Teste, e) MLP Treinamento e f) MLP Teste.....	75
Figura 36 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região do poço AFR 03.....	77
Figura 37 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região AA, poço 02.....	78
Figura 38 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região AT, poço 04.	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Random Forest.	70
Tabela 2 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Gradient Boosting.	71
Tabela 3 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Perceptrons em Múltiplas Camadas.	72
Tabela 4 - Número de combinações, tempo de treinamento e definição dos parâmetros ótimos para cada modelo.	76

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS

API – American Petroleum Institute

BVI - Bulk Volume Irreducible

Q – Carga elétrica

D – Coeficiente de Difusão Molecular

λ – Comprimento de onda

h - Constante de Planck

\hbar - Constante de Planck reduzida

DGEF – Departamento de Geofísica

q – Fluxo de fluido

FID – Free Induction Decay

FFI – Free-Fluid Index

f – Frequência

ω – Frequência Angular

GBR – Gradient Boosting Regressor

G – Gradiente do Campo

H – Hamiltoniana

IR – Inversion-Recovery

LABRES - Laboratório de Engenharia de Reservatórios de Petróleo

LPFR – Laboratório de Propriedades Físicas das Rochas

M – Magnetização

m_{sw} – Massa de água saturante

MC – Mecânica Clássica

MQ – Mecânica Quântica

mD – Milidarcy

\vec{L} – Momento Angular

\vec{S} – Momento de spin

\vec{p} – Momento Linear

$\vec{\mu}$ – Momento Magnético

MLP – Multi Layer Perceptron

N – Número Atômico

Z – Número Atômico

A – Número de Massa
 NE – Números de Ecos
 \vec{I} – Operado de Spin
 $p.p.m$ – Partícula por milhão
 Pa – Pascal
 k - Permeabilidade
 k_{SDR} – Permeabilidade Schlumberger-Doll Research
 k_{Coates} – Permeabilidade Timur-Coates
PTFE – Politetrafluoroetileno
 φ – Porosidade
 φ_{RMN} – Porosidade da Ressonância Magnética Nuclear
 φ_e – Porosidade Efetiva
 φ_s – Porosidade Saturada
 φ_t – Porosidade Total
 RFR – Random Forest Regressor
 γ – Razão Giromagnética
 RMN – Ressonância Magnética Nuclear
 RN – Rio Grande do Norte
 SE – Spin-Echo
 $CPMG$ – Técnica de aquisição Carr-Purcell-Meiboom-Gill
 T – Temperatura
 TW – Tempo de Polarização
 T_1 – Tempo de Relaxação Longitudinal
 T_2 – Tempo de Relaxação Transversal
 TE – Tempo entre os Ecos
 $T_{2\text{ lm}}$ – Tempo médio logarítmico
LTU – Unidade limiar linear
TLU – Unidade lógica de limiar
 $UFRN$ – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
 \vec{E} – Vetor Campo Elétrico
 \vec{B} – Vetor Campo Magnético
 η – Viscosidade dinâmica

1. INTRODUÇÃO

A compreensão das propriedades petrofísicas de um reservatório, seja ele de água ou de hidrocarboneto, é essencial para sua avaliação e elaboração de um plano de trabalho eficaz (Cipolla *et al*, 2010; Rostami, 2022; Erfani *et al*, 2022; Zhang *et al*, 2017; Chen *et al*, 2022; Lu *et al*, 2017; Kang *et al*, 2022). Os parâmetros petrofísicos da porosidade e da permeabilidade são utilizados para caracterização e modelagens de reservatórios (Pan e Connell, 2012; Guerriero *et al*, 2013; Mahdaviara *et al*, 2020).

Os estudos petrofísicos de testemunhos em laboratório possuem a capacidade de: obter melhores condições de contorno da amostra, calibragem das propriedades físicas e petrofísicas da rocha, e auxiliar a correlação de dados de laboratório com dados de campo. Para o estudo em laboratório geralmente se retira *plugs* padronizados do testemunho de poço, desses *plugs* são feitas análises petrofísicas, geofísicas e geológicas. Essa interseção de conhecimentos auxilia o profissional em uma melhor modelagem e compreensão do reservatório.

Das técnicas petrofísicas é possível obter valores diretos e indiretos. Para obter a porosidade e permeabilidade de forma direta pode-se utilizar o porosímetro a gás e permeâmetro a gás, respectivamente. Essas medidas informam apenas o valor absoluto, mas não é possível obter informações adicionais, como por exemplo a distribuição de tamanho dos poros. Já medidas indiretas, como a Ressonância Magnética Nuclear (RMN), nos retornam informações físicas que indicam a presença de poros e sua distribuição de relaxação T_2 . Logo, medidas diretas são importantes para calibragem e comparação dos dados obtidos indiretamente.

As amostras utilizadas nesta dissertação são formadas por rochas carbonáticas da Formação Jandaíra, que afloram nas regiões do Lajedo de Soledade e Arapuá. Esses afloramentos se encontram na porção Centro-Oeste e Leste da Bacia-Potiguar, no estado do Rio Grande do Norte. Esta bacia se localiza na Margem Equatorial Brasileira em sua porção leste. Sua extensão vai do estado do Rio Grande do Norte até o estado do Ceará, onde 87% da bacia se encontra submersa, estendendo-se até os limites territoriais brasileiros. A sua espessura sedimentar pode atingir até seis quilômetros de profundidade, e possui histórico de produção

petrolífera, principalmente óleos, com variação de API de 33° e 41°. (Travassos *et al*, 2021, Lopes *et al*, 2018)

A Formação Jandaíra faz parte do Grupo Apodi e é constituída principalmente por calcarenitos bioclásticos, com foraminíferos, calcilutitos, dismicrito, dolomitos e, eventualmente, lutitos (Araújo *et al*, 2021; Araújo *et al*, 2023). Possui uma profundidade máxima de 600 metros, e possuem porosidade em torno de 10% e permeabilidade geralmente inferior a 1 mD. (Bagni, 2022).

Contudo, certas regiões de afloramento possuem a presença de carstificação, alterando significativamente os resultados petrofísicos da literatura, que adiciona uma maior complexidade para modelagem e se assemelhando analogamente a outros reservatórios. Essa conjectura proporciona um estudo comparativo entre formação de afloramento e de profundidade de maneira análoga.

As amostras são constituídas de *plugs* retirados de testemunhos de poços desses dois lajedos. Foi realizado um estudo petrofísico em laboratório, onde se obteve os valores absolutos de porosidade e permeabilidade através dos experimentos do porosímetro e permeâmetro a gás, seguido da coleta do tempo de relaxação T_2 e obtidas as curvas de distribuição de relaxação T_2 através da técnica de RMN.

Esses valores absolutos servem para avaliação da porosidade dos dados de Ressonância e para modelagens, analíticas e de aprendizado de máquina, da permeabilidade.

1.1. Hipótese

Os modelos analíticos pretendem prever a permeabilidade do material através de funções que foram determinadas empiricamente. Essas funções são construídas através de valores obtidos da curva distribuição de relaxação T_2 e da porosidade da RMN, onde cada variável da função possui um expoente que deverá ser obtido através regressões lineares múltiplas em comparação com valor da permeabilidade absoluta para o ajuste dos dados. Uma vez ajustado os coeficientes dessas funções novos dados podem ser adquiridos e pode ser prever a permeabilidade com certa precisão.

Esta dissertação parte da hipótese de que o aprendizado de máquina é capaz de obter melhores previsões da permeabilidade do que os modelos analíticos. Ao invés de alimentar o modelo de aprendizado de máquina com outros parâmetros petrofísicos e valores específicos da distribuição de relaxação T_2 , pretende-se utilizar apenas a curva de distribuição sem outros parâmetros petrofísicos, geofísicos ou geológicos.

1.2. Objetivos

Esta dissertação tem por objetivo primário contribuir para o avanço da previsão da permeabilidade, concentrando-se na aplicação da técnica de RMN em rochas carbonáticas, donde as amostras estudadas servem como análogos aos reservatórios. Para atingir este objetivo se faz necessário comparar os métodos analíticos, amplamente reconhecidas na literatura, com os modelos de aprendizado de máquina.

O objetivo secundário desta dissertação é realizar o treinamento dos modelos de aprendizado de máquina, pois dada a ausência de modelos pré-treinados específicos para essa finalidade, o autor assumiu a responsabilidade de desenvolver e treinar modelos específicos, demonstrando assim um comprometimento com a inovação e avanço do conhecimento na área, refletindo uma adaptação às demandas contemporâneas da pesquisa, e representa um esforço significativo para explorar novas fronteiras na interpretação de dados petrofísicos em contextos geológicos adversos.

Outro objetivo é buscar não apenas validar a eficácia dos modelos de aprendizado de máquina, mas também proporcionar percepções valiosas sobre a capacidade desses modelos em lidar com nuances específicas das rochas carbonáticas. Dessa forma, a dissertação não se limita apenas a atingir o objetivo declarado, mas também abre caminho para a reflexão sobre as implicações práticas e teóricas dessas abordagens na interpretação de dados petrofísicos, contribuindo assim para o avanço contínuo da pesquisa em geociências e engenharia de reservatórios petrolíferos.

1.3. Estrutura

O segundo capítulo desta dissertação apresenta a fundamentação teórica por meio de uma revisão bibliográfica sobre petrofísica, focada no entendimento dos comportamentos dos reservatórios. Esta revisão da literatura serve como a base sólida sobre a qual se apoiam os desenvolvimentos e previsões realizadas nesta dissertação.

No terceiro capítulo, apresentam-se os materiais e métodos de aquisição de dados, destacando suas propriedades únicas e desafios associados à sua análise. A utilização da Ressonância Magnética Nuclear (RMN) como técnica de aquisição é explorada, juntamente com os parâmetros de treinamento dos modelos provenientes da literatura e de aprendizado de máquina, ressaltando a importância da escolha adequada desses parâmetros para uma análise precisa.

No quarto capítulo se apresenta os resultados e as discussões provenientes da aplicação metodológica em amostras carbonáticas.

No quinto capítulo se faz as considerações finais desse trabalho, apresentando as conclusões e melhorias futuras a essas aplicações para aprimoramento científico.

Os dois apêndices anexados são trabalhos publicados provenientes dessa dissertação.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo contempla a investigação aprofundada das noções petrofísicas, da caracterização de reservatórios, da apresentação dos fundamentos da Ressonância Magnética Nuclear e da análise computacional e do aprendizado de máquina, por meio de revisões teóricas da literatura, para que forneça o suporte necessário ao longo do desenvolvimento desta dissertação. A exploração se inicia com a apresentação das propriedades petrofísicas da porosidade e da permeabilidade. Em seguida se analisa a complexidade de reservatórios e sua caracterização com base nas propriedades petrofísicas. Examina-se os princípios da Ressonância Magnética Nuclear, detalhando os métodos de aquisição e suas aplicações na petrofísica. Por fim, aborda-se os princípios fundamentais dos processos computacionais essenciais para o tratamento de dados, bem como a integração eficaz do aprendizado de máquina, ampliando a compreensão deste abrangente campo interdisciplinar.

2.1. Parâmetros petrofísicos

A petrofísica é o estudo das propriedades físicas das rochas e sua interação com os fluidos, sejam eles gases, água, soluções aquosas e hidrocarbonetos líquidos ou gasosos. Duas são as propriedades principais da petrofísica, a porosidade e a permeabilidade. A partir delas pode-se entender muitas outras características do material estudado. Sendo elas mesmas influenciadas por atributos dos minerais, grãos, fraturas, entre outras. (Tiab e Donaldson, 2016)

Os estudos petrofísicos inicia-se com Kozeny (1927) quando resolveu a equação de Navier-Stokes para o escoamento de fluídos em um meio poroso, e a partir dessa solução foi possível obter relações entre a permeabilidade, porosidade e área da superfície dos poros. Na década de 50 Archie defendeu que esforços de pesquisa voltadas ao fluxo de fluídos em rochas que envolvessem a geologia e as propriedades físicas das rochas fosse chamada de Petrofísica, pois desde Kozeny e os irmãos Schlumberger intensificou-se esses estudos para compreender a dinâmica

dos reservatórios de hidrocarbonetos, tanto para fins acadêmicos como exploratórios. O próprio Archie, anos antes dessa proposição, estudou as propriedades elétricas das rochas quando estas possuem porosidade saturada. Segundo Rizti (2008) Darcy em 1856 investiga o fluxo de água através de meios porosos, desenvolvendo a lei geral para fluxo de fluidos em meios porosos, chamada de Lei de Darcy. Portanto, é a partir dessas intersecções dos estudos de fluídos, geologia, ambientes porosos, propriedades físicas das rochas que se fundamenta os estudos petrofísicos e sua aplicabilidade. (Tiab e Donaldson, 2016)

2.1.1. Porosidade

A palavra “poro” deriva da palavra grega (*πόρος – póros*) que significa passagem, sendo assim o poro é o espaço que possui a capacidade de conduzir algo. Contudo, é natural que durante o processo de formação da rocha nem todo o espaço esteja preenchido com minerais ou sedimentos, sendo esses espaços “vazios” denominados de poros, uma vez que podem conduzir os fluidos que lá estão.

A porosidade (ϕ) se trata de uma propriedade física que relaciona o espaço poroso com o volume do material estudado. As interações entre rocha e o(s) fluido(s), ou entre fluido/fluido acontecem no espaço poroso. A porosidade total (ϕ_t) leva em conta todo o espaço poroso do material (1).

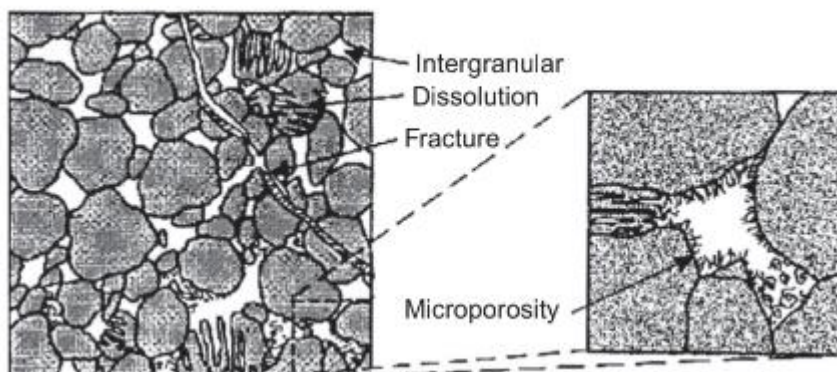
$$\phi_t = \frac{\text{Volume Total} - \text{Volume Rocha}}{\text{Volume Total}} = \frac{V_t - V_r}{V_t} \quad (1)$$

Porém a porosidade efetiva (ϕ_e) leva em conta apenas os poros que se conectam a ponto de poderem transmitir os fluidos em seu interior de uma região a outra de interesse (2).

$$\phi_e = \frac{\text{Volume Poros Conectado}}{\text{Volume Total}} = \frac{V_{pc}}{V_t} \quad (2)$$

Da classificação da porosidade de acordo com a geologia apresenta-se duas formas. A primeira quando se leva em conta a formação da rocha, chamando a porosidade de primária, e quando a rocha, uma vez formada, sofre processos que alteram a porosidade primária, chama-se então de porosidade secundária, eles podem ser verificados na figura 1. (Tiab e Donaldson, 2016).

Figura 1 - Tipos de porosidade primária e secundária.



Fonte: Tiab e Donaldson (2016, p. 71).

A porosidade primária é determinada quando a rocha ainda está se formando e, por sua natureza deposicional, resta espaços vazios. Esses espaços vazios podem ocorrer durante a mineralização dos cristais, chamada de porosidade intercristalina. Também pelos espaços entre os grãos cristalizados, chamada de porosidade intergranular. No contato entre camadas diferentes de deposição ocorre também a criação de porosidade, chamada de porosidade nos planos de estratificação. Por fim, porosidades diversas, mas não incomuns, relacionadas a algumas situações e com alguns ambientes deposicionais específicos, por exemplo a porosidade deixada por um ser vivo, quando acontece o soterramento, o fóssil deixará o espaço vazio que poderá ser preenchido por algum fluido, ou quando o ser vivo, que, com seu metabolismo, auxilia a deposição de íons no leito, morre no ambiente que ele mesmo ajudou a construir, ou mesmo cavidades não preenchidas ou criadas durante a deposição.

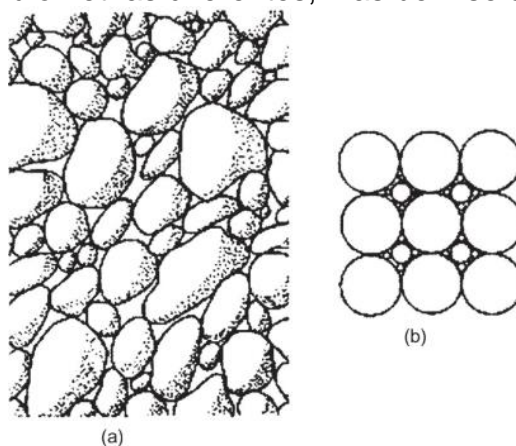
A porosidade secundária é determinada quando a rocha, uma vez formada, sofre processos físicos e químicos que alteram a sua porosidade inicial. Por exemplo, esforços tectônicos fraturam as rochas alterando a porosidade, em muitos casos não há um aumento da porosidade, contudo afeta a conexão dos poros, uma vez que o material rochoso formado por sedimentos ou minerais tende a se rearranjar ao longo das zonas de fraqueza. Outros processos físicos que alteram as rochas de forma secundária seriam, o deslizamento de rochas causadas por gravidade, impactos ou mesmo atividade de seres vivos (incluindo os humanos), dissolução pela presença de

fluidos, fluidos que transportam minerais ou íons de um local a outro da bacia sedimentar ao longo dos poros, no primeiro caso há um aumento da porosidade local e no segundo uma diminuição da porosidade. A dolomitização ocorre quando íons de Cálcio (Ca) são trocados por íons de Magnésio (Mg), onde o volume iônico do magnésio sendo menor que o do cálcio acaba por aumentar a porosidade do material (Tiab e Donaldson, 2016).

Ambas as porosidades possuem sua magnitude afetadas por fatores geomorfológicos. Dos fatores que regem a magnitude da porosidade destaca-se a boa seleção dos grãos e tamanho dos cristais, grau de cimentação ou consolidação, compactação e empacotamento dos grãos ou minerais. Desta forma, saber essas informações previamente auxiliará nas interpretações dessa porosidade como ajudará na melhor aplicabilidade de modelos.

A seleção dos grãos, Figura 2, compete a variância de tamanho que os grãos da rocha apresentam. Uma alta variância indica uma má seleção, implicando que com tamanhos maiores formam poros maiores, porém esses poros estarão preenchidos por grãos menores, diminuindo, então, a porosidade.

Figura 2 - a) Seleção de grãos de diferentes tamanhos e formatos, b) seleção de grãos com três granulometrias diferentes, mas bem selecionados entre elas.



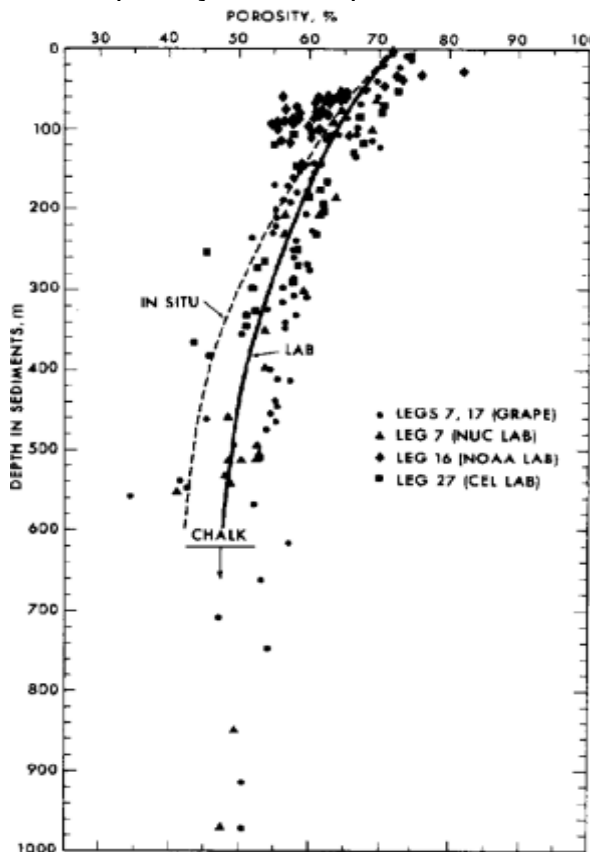
Fonte: Tiab e Donaldson (2016, p. 69).

O grau de cimentação ou consolidação dos grãos compete ao quanto a rocha passou pelo processo de litificação (Baud *et al*, 2019). Uma vez que a rocha se forma, fluidos passam a percolar os poros, podendo ocorrer os seguintes passos. Grãos mais finos, como argilas e siltes preenchem poros, no caso do arenito, e podem acabar

liberando íons, que por sua vez cimentam essa rocha. No caso dos carbonatos, minerais mais finos (micrita e esparito) acabam por se cristalizar e cimentam os grãos maiores de carbonatos, em especial calcário e dolomito, consolidando. Se esses íons que estão sendo depositados estiverem sendo retirados dos próprios sedimentos ou minerais a porosidade não deve ser alterada, porém se forem de outros ambientes a porosidade deve diminuir e, conseqüentemente, o ambiente que perdeu íons deverá ter um aumento da porosidade.

Os efeitos da compactação na diminuição da porosidade foram observados por Hamilton (1976). O estudo apresenta uma redução da porosidade com o aumento da profundidade, figura 3, pois depois da formação da rocha sedimentar, a massa superior aumentará a pressão nos sedimentos ou minerais os fazendo compactarem em arranjos cada vez mais justos, tendendo a expulsar os fluidos dos poros pelo novo rearranjo dos grãos. Esse processo é o mecanismo básico da migração de fluidos em subsuperfície aliado a um aumento térmico. Em geral, rochas mais antigas e profundas possuem menor porosidade devido a esse processo de compactação. Entretanto, rochas carbonáticas sofrem pouco com esse processo de compactação, sendo assim possível o estudo delas como rochas análogas, seja em afloramento ou em altas profundidades (Tiab e Donaldson, 2016).

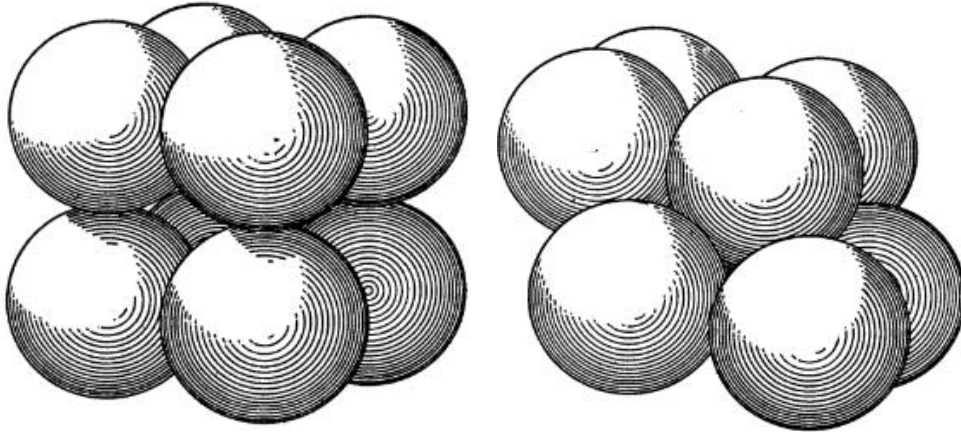
Figura 3 - Aumento da compactação com a profundidade afetando a porosidade.



Fonte: Hamilton (1976, p. 282).

O empacotamento, Figura 4, se refere ao arranjo com que os grãos se depositam. Graton e Fraser (1935) propôs esse estudo para avaliar como essa característica geométrica dos grãos influencia a porosidade e permeabilidade. Esse estudo com grãos de mesmo tamanho e esféricos ajuda no entendimento dos espaços vazios. Alguns sistemas foram propostos, em especial os mais antagônicos, o cúbico e o romboédrico. Esses dois modelos de empacotamento dão a maior e menor porosidade respectivamente. Em geral, se houver boa seleção, e pouca compactação e cimentação, o empacotamento acontecerá em valores médios dos extremos, entre cúbico e romboédrico.

Figura 4 - Sistema Cúbico e Romboédrico de empacotamento.



Fonte: Graton e Fraser (1935, p. 796).

2.1.2. Permeabilidade

Um material poroso poderá conduzir fluidos se houver conectividade entre esses poros, ou seja, caso haja porosidade efetiva. Essa capacidade de conduzir fluidos é chamada de permeabilidade. Portanto, apenas a porosidade efetiva é relevante para o entendimento da permeabilidade.

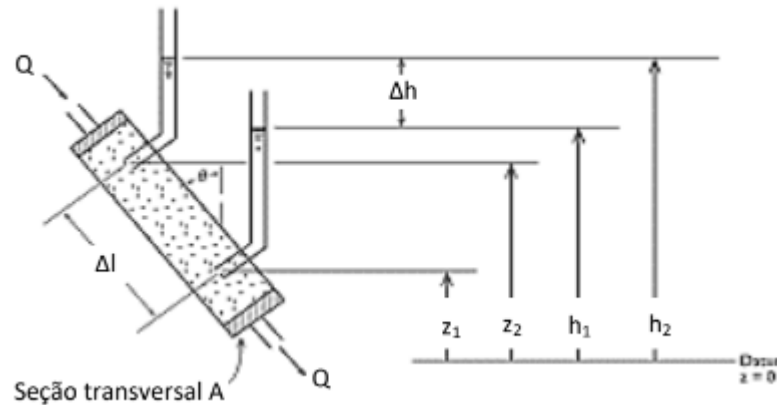
Darcy (1856) desenvolveu uma equação experimental (3) para o fluxo de fluidos, Figura 5. Essa equação é chamada de Lei de Darcy e é amplamente utilizada em experimentos de laboratório. Porém essa lei só é aplicada com as seguintes condições: o fluxo está em estado estacionário, a rocha está 100% saturada, a viscosidade do fluido é constante, está em condições isotérmicas, a porosidade é constante independente da pressão, o escoamento é laminar e as forças da gravidade são desprezíveis (Tiab e Donaldson, 2016, p. 362).

$$q = \frac{1,127 \times 10^3 (\kappa A \Delta P)}{\eta L} \quad (3)$$

Onde q é o fluxo do fluido medido em m^3/s , κ a permeabilidade medida em μm^2 , η a viscosidade dinâmica do fluido em $Pa \times s$, ΔP como sendo gradiente de pressão entre as extremidades da amostra medido em $10^{12} Pa/m$, A como a área

transversal ao sentido do fluxo medida em m^2 , L o comprimento da amostra medida em m . O experimento pode ser visto na Figura 5. Vale salientar que a medida de Darcy (m^2) é um valor muito grande, por isso o sistema internacional de medidas (S.I) utiliza o valor de permeabilidade em milidarcy (μm^2).

Figura 5 - Experimento laboratorial para medição da permeabilidade.



Fonte: Mafra, 2022, p. 24.

Em um fluido monofásico, ou seja, quando o poro possui apenas um único fluido, chama-se permeabilidade absoluta. Se tiver mais de um fluido, ou multifásico, chama-se então de permeabilidade efetiva. Nos casos da permeabilidade da água, óleo e gás temos as siglas κ_w , κ_o e κ_g , respectivamente. Então há uma relação entre as permeabilidades absolutas e efetivas (4), chamada de permeabilidade relativa:

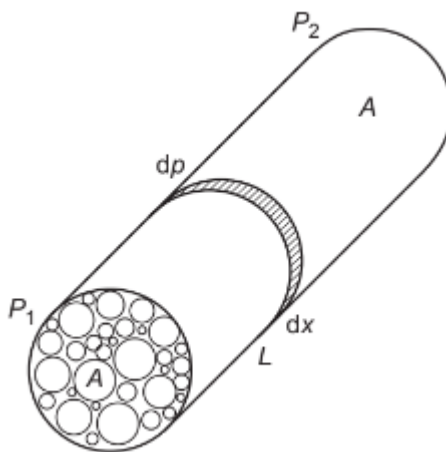
$$\kappa_{rw} = \frac{\kappa_w}{\kappa} ; \kappa_{ro} = \frac{\kappa_o}{\kappa_o} ; \kappa_{rg} = \frac{\kappa_g}{\kappa} \quad (4)$$

Outra lei importante para o entendimento do fluxo de fluido através de rochas é a Lei de Pousivelle's (Pftizner, 1976). Pousivelle avaliou a permeabilidade (5) do sangue em vasos sanguíneos, que posteriormente foi utilizado pela petrofísica como a condução de fluido por tubos capilares (6). A Figura 6 apresenta o modelo de Pousivelle's (Tiab e Donaldson, 2016).

$$k_{Pousivelle's} = \frac{\sum n_i r_i^4}{8R^2} \quad (5)$$

$$q_{Pousivelle's} = \frac{\pi r^4 \Delta P}{8\eta l} \quad (6)$$

Figura 6 - Representação da Lei de Pousivelle's.



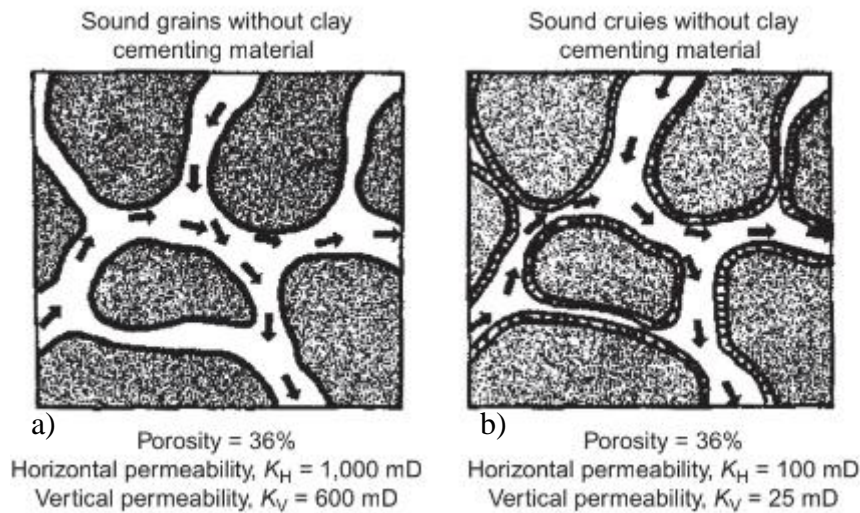
Fonte: Tiab e Donaldson (2016, p. 236).

Nestes casos o n é a quantidade de tubos com o mesmo raio r medido em cm , o R é o raio da rocha por onde passa o fluxo em cm , o ΔP é a variação da pressão em $dynes/cm^2$, o η é a viscosidade do fluido medido em poises e l é o comprimento do tubo em cm .

Como é possível perceber a permeabilidade é influenciada pela direção da medição se comportando como vetor, já que depende da direção onde é aplicada a variação de pressão para que ocorra o fluxo de fluido. Já a porosidade não depende da posição, ou seja, comporta-se como um escalar. Devido a isso temos então as medições mais comum da permeabilidade sendo a vertical κ_v e horizontal κ_h à superfície.

E, assim como a porosidade, a permeabilidade também tem origens diferentes, chamada de permeabilidade primária e secundária. Segue-se também a mesma lógica, pois a permeabilidade está relacionada com a presença de poros conectados, porosidade efetiva, sendo a criação ou fechamento de poros o influenciador da permeabilidade. Por isso, efeitos de dissolução, cimentação, fratura etc., irão afetar a permeabilidade. A Figura 7 apresenta uma rocha que possuem iguais porosidades, mas uma teve uma dissolução dos grãos gerando uma cimentação, e por isso ocorreu a diminuição da permeabilidade sem alterar a porosidade (Tiab e Donaldson, 2016).

Figura 7 - Efeito da cimentação na permeabilidade.



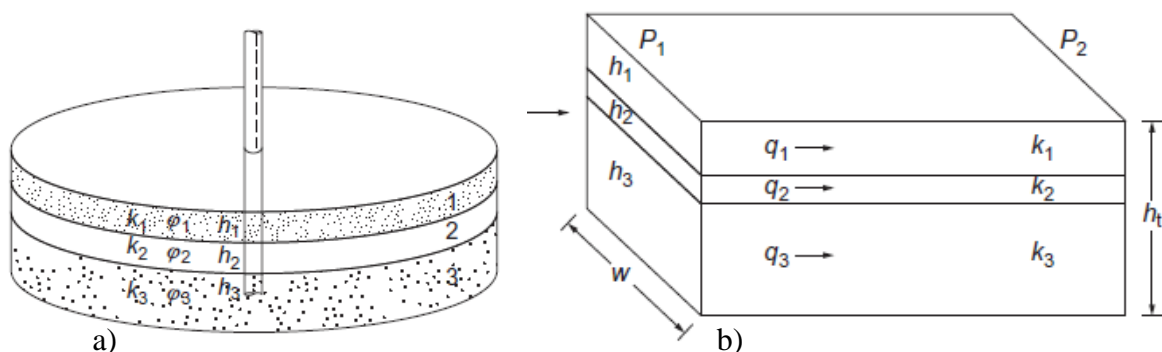
Fonte: Tiab e Donaldson (2016, p. 81).

Devido a esse comportamento vetorial e a natureza das rochas não se comportarem de maneira regular, a permeabilidade também é composta por uma ou mais permeabilidades. Russell e Prats (1962) confirmaram que a permeabilidade de reservatórios pode se comportar como um conjunto de sistemas homogêneos. Portanto, um fluxo pode passar por sistemas homogêneos verticais, Figura 8-a, e horizontais, Figura 8-b, daí pode verificar as permeabilidades de cada camada homogênea (7) e (8).

$$\frac{h_t}{\kappa_{\perp}} = \frac{h_1}{\kappa_1} + \frac{h_2}{\kappa_2} + \dots + \frac{h_n}{\kappa_n} \quad (7)$$

$$\kappa_{\parallel} = \frac{\sum \kappa_i h_i}{\nabla h} \quad (8)$$

Figura 8 - Representação de permeabilidade em série (a) e paralelo (b).



Fonte: Tiab e Donaldson (2016, p. 401).

Dos fatores que influenciam a magnitude da permeabilidade pode-se destacar a morfologia do grão e sua distribuição na amostra, laminação, cimentação e fraturas e/ou dissoluções.

A morfologia do grão e sua distribuição na amostra nos dá informações valiosas quanto à permeabilidade vertical e horizontal. Grãos grandes e com bom arredondamento a permeabilidade tende a ser alta em ambas as direções. Já grãos pequenos e irregulares tendem a dar uma baixa permeabilidade, principalmente na direção vertical, pois a compactação tende a alinhar os grãos em um mesmo sentido (Tiab e Donaldson, 2016).

A laminação ocorre devido a deposição de minerais laminares ou muito finos (siltes ou argilas), acabando por barrar a permeabilidade vertical. As argilas também têm outra importância, já que alguns minerais podem inchar na presença de fluidos e acabarem por impedir o fluxo.

A cimentação atrapalha a permeabilidade já que interfere na porosidade e por ter minerais muito finos, diminuem as seções por onde o fluido irá passar.

As fraturas e dissoluções ajudam na permeabilidade pois fornecem dutos mais ou menos uniformes por onde o fluido possa passar. Em rochas sedimentares clásticas as fraturas não são tão relevantes, a menos que haja intercalações de laminações, mas em rochas sedimentares não-clásticas esses processos podem auxiliar ou não na condução de fluidos e no aumento da porosidade.

2.2. Reservatórios

Os reservatórios, no contexto geológico, compreendem regiões rochosas que contém fluidos armazenados com potencial de prospecção. Neste sentido, as rochas que formam o reservatório são compostas principalmente de rochas sedimentares que eventualmente podem possuir em seus limites rochas ígneas ou metamórficas, que impedem os fluidos de extravasarem.

A caracterização do reservatório é um passo importante para a realização do estudo e de planos exploratórios. A partir dessa avaliação é possível modelar o comportamento e a viabilidade exploratória. Abordagens geológicas levam em conta

o sistema deposicional e mineralização, classificando assim as fácies sedimentares, bem como os processos diagenéticos que alteram a rocha. Já a petrofísica avalia índices correlativos entre fluxo hidráulico e características do sistema poroso, como tamanho e distribuição dos poros, por exemplo.

Dunham (1962) elaborou um modelo de classificação das fácies carbonáticas que levam em conta o sistema deposicional e a textura da rocha, sendo amplamente utilizada na caracterização de reservatórios carbonáticos. Os mecanismos diagenéticos ocorrem após a sedimentação da rocha, incluem diversos processos, dentre eles a bioturbação e dissolução por exemplo, e processos posteriores como a formação de fraturas ou brechas por esforços mecânicos (Kadkhodaie e Kadkhodaie, 2018; Zou *et al*, 2008).

Amaefule *et al* (1993) desenvolveu um modelo de avaliação do reservatório utilizando unidades hidráulicas. Inicia com o princípio de quantificar a qualidade do reservatório por meio da avaliação da razão entre a porosidade (φ) e a permeabilidade (k), dessa avaliação é possível obter índices de qualidade do reservatório (RQI – Reservoir Quality Index) (9).

$$RQI = 0,0314 \sqrt[2]{\frac{k}{\varphi}} \quad (9)$$

A partir do índice de qualidade do reservatório é possível identificar zonas de fluxo hidráulico semelhante através da razão RQI e a razão de volume poroso (φ_z) (10), indicando um novo índice denominado de zona de fluxo (FZI – Flow Zone Index) (11).

$$\varphi_z = \frac{\varphi}{(1 - \varphi)} \quad (10)$$

$$FZI = \frac{RQI}{\varphi_z} \quad (11)$$

Através desses índices é possível identificar determinadas regiões semelhantes no reservatório, tornando possível a sua modelagem de maneira mais precisa. Sendo tais índices obtidos principalmente através dos valores de porosidade e permeabilidade.

2.3. Ressonância magnética nuclear

Ressonância, segundo o dicionário Michaelis, é a “tendência de um sistema mecânico para absorver mais energia quando a frequência de suas oscilações se iguala à frequência de vibração natural do sistema.”, ou seja, é um fenômeno físico que ocorre quando um sistema é excitado por uma fonte externa em sua frequência natural de vibração. Quando isso ocorre a amplitude da resposta do sistema é maximizada. É, portanto, a partir da ressonância que é possível estudar alguns comportamentos da matéria.

O magnetismo é um dos fenômenos da matéria mais antigos identificados pelo homem. Mas o entendimento moderno começou a ser mais bem documentada com o experimento de Hans Cristian Ørsted (1777-1851). Ele percebeu o efeito magnético gerado por uma corrente elétrica quando aproximava uma agulha magnética, bússola, próximo a um fio que conduzia corrente. Uma dedução matemática para esse efeito foi elaborada por André Marie Ampère (1775-1836). Michael Faraday (1791-1867) percebe também que uma variação do fluxo magnético dentro de um solenoide gerava uma corrente elétrica, Franz Ernst Neumann (1798-1895) formula a conhecida Lei de Faraday. Essa simbiose entre eletricidade e magnetismo levou James Clerk Maxwell (1831-1879) a generalizar as formulações matemáticas que se tinha da eletricidade e magnetismo, sintetizando-as em quatro equações, formulando a base do eletromagnetismo clássico.

Com essas equações foi possível compreender a os fenômenos ondulatórios de uma forma mais ampla, como por exemplo a luz que é uma composição de ondas eletromagnéticas (12) e (13).

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \therefore \vec{E} = E_0 e^{i(Kx - \omega t)} \hat{k} \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 B}{\partial t^2} = 0 \therefore \vec{B} = B_0 e^{i(Kx - \omega t)} \hat{k} \quad (13)$$

Porém a luz comporta-se também como partícula, sendo percebida por efeitos como reflexão, espalhamento Compton e o efeito fotoelétrico. Este último formulado por Albert Einstein (1879-1955) quantifica a energia de um fóton (14) a partir a constante de Planck (h) e a frequência do fóton incidente (f).

$$E = hf \quad (14)$$

Louis De Broglie (1892-1987) propõe então que o comprimento de onda de uma partícula é dado pela razão entre a constante de Planck e seu momento linear (p) (15).

$$\lambda = \frac{h}{\vec{p}} \quad (15)$$

Sabendo que a constante de Planck reduzida é dada pela divisão por dois pi podemos obter que a energia é dada pela equação (16), e o momento linear dado pela equação (17):

$$E = h \cdot f = 2\pi\hbar f = \hbar\omega \quad (16)$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar K \quad (17)$$

O problema é que ao pôr essas informações na equação de onda convencional não era possível prever a posição das partículas e seus efeitos, como alguns efeitos magnéticos. Precisou-se então modificar o entendimento da mecânica para as partículas, dando início então à Mecânica Quântica (MQ).

Ora, os fenômenos nucleares são, portanto, fenômenos quânticos e, exatamente por isso, é preciso a compreensão da MQ para entender os efeitos magnéticos e, conseqüentemente, da RMN. Porém Hanson (2008) nos informa que não é necessário conhecer a MQ para interpretar os efeitos da RMN, ele afirma na verdade que em muitos casos os profissionais possuem um conhecimento insuficiente da MQ levando-os a interpretações da física incorretas. Ele alega que a explicação a partir da Mecânica Clássica (MC) deveria ser a empregada caso o interpretador a utilize apenas para a interpretação dos resultados de RMN. Mas ressalta também que a não compreensão da MQ prejudica o entendimento de determinados fenômenos magnéticos.

Pois bem, desde a Idade Média a ciência segue o princípio da economia, chamada de Navalha de Ockham, proposta pelo frei franciscano Guilherme de Ockham (1285-1347). Esse princípio postula que entre duas teorias que explicam o mesmo fenômeno ganha a teoria que seja mais “simples”. Por mais simples entende-se aquela que contenha um menor número de variáveis e hipóteses.

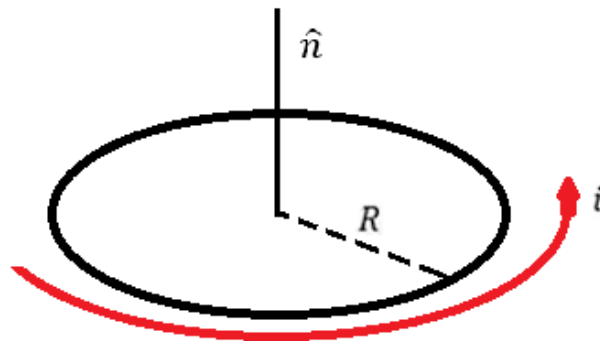
Logo, este trabalho de dissertação mestrado apresentará a explicação a partir da MC.

2.3.1. Entendimento da RMN através da física clássica

O magnetismo é uma propriedade fundamental da matéria que possui a capacidade de atrair ou repelir outros materiais. Trata-se de uma propriedade semelhante as propriedades elétricas, com a diferença de sempre possuir propriedades opostas, de atração e repulsão, constituídas então sempre de dipolos. Essa propriedade fundamental é observada em uma escala microscópica e macroscópica, sendo os efeitos em cada escala possui interpretações distintas. A grandeza física que mede a intensidade e orientação das propriedades magnéticas é denominada de momento magnético (μ).

O momento magnético (μ) na MC está associado a carga em movimento. Ela pode ser facilmente observada no caso de uma espira, figura 9, que conduz corrente (18).

Figura 9 - Corrente elétrica em uma espira circular.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

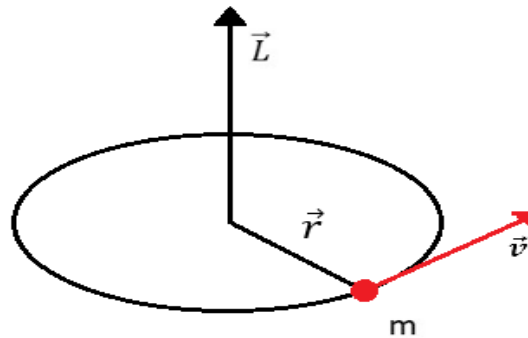
$$\mu_{\text{espira}} = iA\hat{n} = i\pi R^2\hat{n} \quad (18)$$

Onde “ i ” é a corrente elétrica (carga em movimento) e “ A ” a área da espira. Seguindo a convenção da regra da mão direita o vetor da magnetização representada por \hat{n} será perpendicular a área da espira.

Tomemos então o exemplo, figura 10, de uma partícula com massa (m) que possui um movimento de rotação ao redor de um eixo com distância específica (\vec{r}). Essa partícula possuirá momento angular (\vec{L}). Entende-se que esse momento angular

será dado pelo produto vetorial (19) entre o vetor \vec{r} e o momento linear \vec{p} , onde o momento linear é dado pelo produto da massa (m) e da velocidade (\vec{v}).

Figura 10 - Partícula de massa “m” com movimento rotacional ao redor de um eixo.

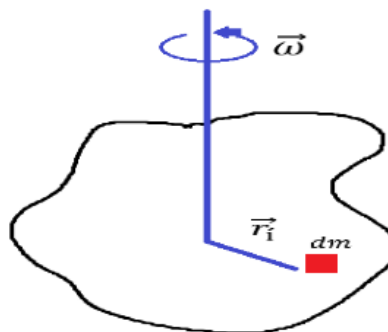


Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (19)$$

Ao invés de partículas podemos ter um corpo que gira ao redor de um eixo. Se esse eixo estiver fora do corpo então temos o mesmo movimento angular de uma partícula vista na figura 10 e dada pela equação (16). Porém, se o eixo de rotação estiver presente no corpo teremos o momento de angular de “*spin*”. Pode-se exemplificar que o *spin* é um momento angular onde o eixo de rotação está centrado no corpo, figura 11.

Figura 11 - Corpo com momento de spin.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

O momento angular (\vec{p}) (20) é dada pela soma de todas as frações diminutas da massa do corpo e das suas velocidades em relação ao eixo de rotação.

$$\vec{p} = \sum dm \quad (20)$$

Portanto, o cálculo do momento de angular será dado pela somatória integral de todas esses vetores de distância e seus momentos lineares (21):

$$\vec{L} = \sum (\vec{r}_i \times \vec{p}_i) = \sum (\vec{r}_i \times dm \frac{d\vec{r}_i}{dt}) = \int \vec{r} \times dm \frac{d\vec{r}_i}{dt} \quad (21)$$

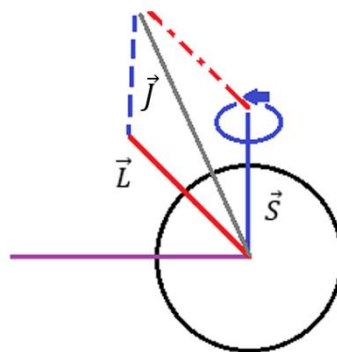
Toleremos o caso em que a massa (m) e a velocidade (\vec{v}) das partículas do corpo sejam constantes. Assim o momento angular será simplificado dessa forma (22):

$$\vec{L} = \int \vec{r} \times dm \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \int \vec{r} \times \vec{v} dm = \int r^2 \vec{\omega} dm = \vec{\omega} \int r^2 dm = \vec{\omega} I \therefore \vec{S} = I \vec{\omega} \quad (22)$$

A integral resultante é chamada de momento de inércia (I) e pode ser um tensor dependendo do corpo. Essa expressão resultante é chamada de *spin* clássico (\vec{S}).

Dessa maneira o *spin* (\vec{S}) é caracterizado por um movimento de rotação e o momento angular (\vec{L}) está relacionado a um movimento orbital. Se um corpo possuir esses dois movimentos, figura 12, ele possuirá uma resultante chamada de momento angular total (\vec{J}).

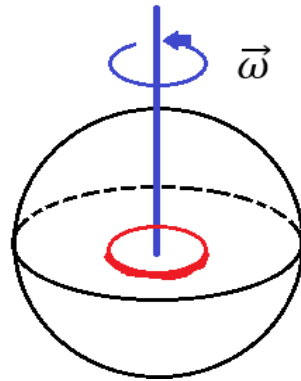
Figura 12 - Corpo com movimentos de rotação e movimento orbital.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Se esse corpo possuir carga e movimento de *spin*, por exemplo, a carga estará em movimento e gerará um campo magnético baseada na frequência de rotação, figura 13. Tomemos, por exemplo, o caso de um corpo esférico de raio (R) com carga (Q) e massa (M).

Figura 13 - Esfera com movimento orbital.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Para fazermos uma analogia com o momento magnético de uma espira (18) podemos separar um anel dessa esfera de raio (r) de área vazada (dA) e de volume (dv) (23):

$$r_1 = r \sin \theta ; dA = \pi r^2 \sin^2 \theta ; dv = 2\pi r^2 \sin \theta d\theta dr \quad (23)$$

Temos então uma densidade de carga (ρ_e) (24):

$$\rho_e = \frac{Q}{V} = \frac{dq}{dv} \rightarrow dq = \frac{Q}{V} dv = \frac{3Q}{4\pi R^3} dv \quad (24)$$

Sabemos que a corrente (i) é dada pela variação de carga pelo tempo (25), e o tempo da variação, neste exemplo, está relacionada à frequência angular de rotação.

$$i = \frac{dq}{dt} = dq \rightarrow di = \frac{3Q}{4\pi R^3} dv \frac{\omega}{2\pi} \quad (25)$$

Logo, o momento magnético desse anel será (23):

$$d\vec{\mu} = di dv dA \hat{n} = \frac{3Q}{4\pi R^3} dv \frac{\omega}{2\pi} 2\pi r^2 \sin \theta d\theta dr \pi r^2 \sin^2 \theta \rightarrow \quad (26)$$

$$d\vec{\mu} = \frac{3Q\omega r^4 \sin^3 \theta}{4R^3} d\theta dr$$

Se quisermos saber o momento magnético ($\vec{\mu}$) da esfera precisamos integrar nos limites da esfera (27):

$$\int d\vec{\mu} = \int \frac{3Q\omega r^4 \sin^3\theta}{4R^3} d\theta dr \rightarrow \vec{\mu} = \frac{3Q\omega}{4R^3} \int_0^R r^4 dr \int_0^\pi \sin^3\theta d\theta \rightarrow$$

$$\vec{\mu} = \frac{3Q\omega R^5}{4R^3} \frac{4}{5} \frac{1}{3} \hat{n} \rightarrow \vec{\mu} = \frac{Q\omega R^2}{5} \hat{n} = \frac{QR^2\vec{\omega}}{5}$$
(27)

Como foi colocado, o corpo possui uma rotação e uma massa, assim é possível saber seu momento de inércia e o momento de spin (28):

$$\vec{S} = I\vec{\omega} = \vec{\omega} \int r^2 dm = \frac{2}{5} MR^2 \vec{\omega}$$
(28)

Nós temos então que a frequência angular ($\vec{\omega}$) tanto no momento de *spin* como no momento magnético. Sendo assim, podemos igualar as frequências angulares (29) para obtermos o momento magnético em função do momento de *spin*:

$$\vec{\omega} = \frac{5\vec{\mu}}{QR^2} = \frac{5\vec{S}}{2MR^2} \rightarrow \vec{\mu} = \frac{Q\vec{S}}{2M}$$
(29)

Pensando de maneira clássica, associa-se sempre uma razão entre o momento magnético de um corpo, com massa e carga, com o momento de *spin*, essa razão é denominada por razão giromagnética (γ) (30):

$$\gamma = \frac{Q}{2M}$$
(30)

Portanto, temos o momento magnético associado ao spin (\vec{S}) e ao momento angular (\vec{L}):

$$\mu_S = \gamma_S \vec{S}_{\text{Clássico}} ; \mu_L = \gamma_L \vec{L}_{\text{Clássico}}$$

Podemos compreender então que partículas com massa e carga deverão possuir momentos magnéticos, podendo ser associados ao *spin* (μ_S), ao orbital (μ_L) ou a resultante dessas duas.

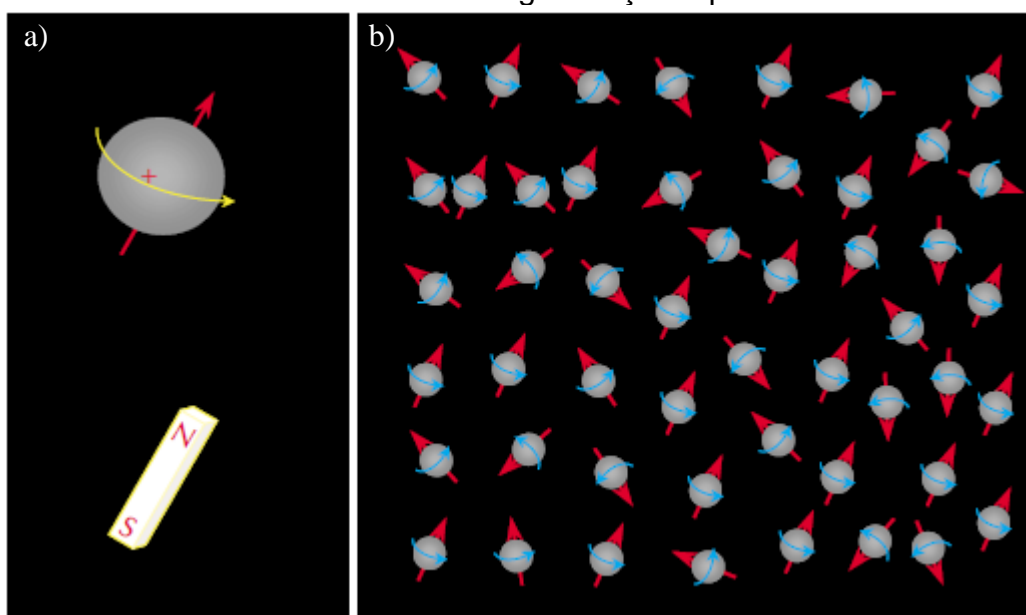
Os átomos são compostos por núcleos e eletrosfera, onde o núcleo possui prótons e nêutrons, ambos com massa, mas apenas o próton com carga elétrica, e a eletrosfera possui elétrons com massa e carga elétrica. Como o núcleo atômico e os elétrons possuem momentos magnéticos, é possível entender esse momento associando um movimento a essas partículas. No caso do elétron está associada ao movimento angular que este faz ao redor do núcleo, e o núcleo ao momento de *spin*.

Vejamos o caso concreto do núcleo atômico do hidrogênio (H_1) que é um próton e o elemento químico utilizado para obtenção de dados petrofísicos desta

dissertação. Seu núcleo possui apenas um próton, o que facilita seu entendimento, pois se pode modelar classicamente seu momento magnético a partir de um momento de *spin* de uma esfera (29), ou seja, um pequeno dipolo magnético conforme ilustrado na figura 14-a. Sendo assim todo átomo de hidrogênio presente nas moléculas da água ou nas cadeias de hidrocarbonetos podem ser submetidos a frequências específicas para que entrem em ressonância sabendo da sua razão giromagnética e o campo magnético aplicado.

Podemos nos perguntar então, se em um determinado meio com inúmeras partículas de hidrogênio por qual razão não há magnetismo macroscópico? Ou seja, a somatória desses pequenos momentos de spin microscópicos não resulta em um magnetismo macroscópico? Isso pode ser explicado pelo fato de que, em temperatura ambiente e estando equilíbrio térmico, os momentos magnéticos microscópicos tendem a permanecer desordenados devido a energia térmica, que é suficiente para superar as interações entre os *spins*. Pensando classicamente, os vetores dos momentos magnéticos se distribuem em direções aleatórias, causando uma magnetização macroscópica igual a zero conforme ilustrado na figura 14-b.

Figura 14 – Representação de a) uma partícula com movimento de spin representada por um vetor e que se assemelha a um ímã por possuir momento magnético, b) uma população aleatória de partículas com momentos magnéticos, resultando em uma magnetização líquida zero.



Fonte: COATES (1999, p. 34).

No caso dos fluidos, em especial a água (H_2O) e os hidrocarbonetos, como metano (CH_4) e butano (C_4H_{10}) que são fluidos amplamente utilizados nos estudos petrofísicos de reservatório, os vetores dos momentos magnéticos dos átomos de hidrogênio possuem magnetização líquida igual a zero, em condições normais de temperatura. No entanto, esses momentos magnéticos podem ser induzidos a gerarem uma magnetização em determinadas condições.

Como então é possível obter uma magnetização líquida resultante de determinadas materiais como o hidrogênio? A ideia por trás desse questionamento é aplicar um campo magnético externo que alinhe os spins nucleares, causando a polarização do material. Uma vez polarizados os spins podem ser excitados a entrarem em ressonância por meio de pulsos em radiofrequência (RF), gerando uma perturbação temporária. Essas perturbações geram sinais que podem ser medidos através de equipamentos eletrônicos.

Trabalhemos então com o próton do hidrogênio. Se o conjunto de prótons é submetido a um campo magnético externo, ao longo do eixo “z” por exemplo, um torque é aplicado nos vetores de *spins*, ocasionando um movimento de precessão. Essa precessão não mudará o vetor dos *spins*, mas gerará uma magnetização resultante através da polarização dessas precessões, na direção do vetor do campo magnético externo. Cessando a submissão do campo magnético, os prótons voltarão ao seu estágio inicial, perdendo então a sua precessão, e conseqüentemente sua magnetização resultante, uma vez que eles entraram em equilíbrio térmico. O que se faz através de um experimento de RMN, analisando em uma perspectiva da MC, é garantir que os *spins* dos prótons tenham uma magnetização resultante em uma única direção através de seu alinhamento ao campo, para que seja somada as suas magnetizações resultantes através de um sinal coerente e capaz de ser captado pelo equipamento.

Para magnetizar os *spins* é preciso submetê-los a um campo magnético intenso e homogêneo (B_0), causando a sua precessão em torno deste campo. Em seguida, submete-se esses prótons um novo campo magnético perpendicular (B_1) que oscila de Frequência de Larmor (f_L) (31), que no caso do hidrogênio é de 42,58 MHz/Tesla (Schön, 2015). Esse f_L está associada a razão giromagnética (γ) do próton. É através dessa frequência de oscilação que os prótons entram em ressonância e alterando a polarização da precessão em torno de B_0 para B_1 . Quando

B_1 é retirado, apenas os *spins* que sofreram alteração da polarização voltam a se polarizar na direção do B_0 . Esse processo geram os sinais detectáveis, correspondentes aos tempos de relaxação T_1 e T_2 .

$$f_L = \frac{\gamma B_0}{2\pi} \quad (31)$$

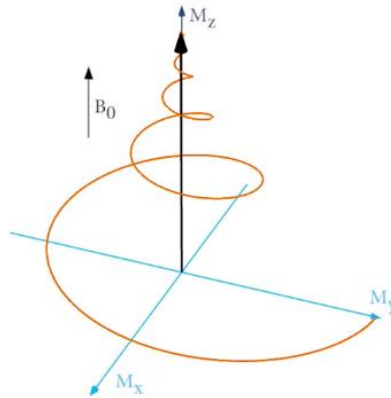
Sem adentrar muito na MQ é interessante notar que a magnetização macroscópica resultante associada a polarização dos *spins* segue a Lei de Curie (32), e, portanto, é inversamente proporcional a temperatura, o que é característico de materiais paramagnéticos sob influência de um campo magnético externo.

$$M_0 = N \frac{\gamma^2 h^2 I(I+1)}{3(4\pi^2)kT} B_0 \quad (32)$$

Onde N representa a densidade de *spins* no volume estudado, h é a contante de Planck, I é um operador de *spin*, que pode assumir valores inteiros e semi-inteiros ($0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$), sendo $1/2$ no caso do hidrogênio, k é a constante de Boltzman's e T a temperatura em K. Dois parâmetros controláveis nesse processo são a temperatura e a intensidade do campo, onde diminuir a temperatura ou aumentar a intensidade do campo auxilia na polarização dos *spins*, resultando em uma maior magnetização líquida.

A aplicação de pulsos de RF, na frequência de Larmor dos *spins* desejados, gera um torque que reorienta a magnetização desses *spins* já polarizados em torno do campo B_1 . A retirada desses pulsos causa a relaxação dos *spins* em direção do campo B_0 , uma vez que eles irão retornar ao equilíbrio térmico. O processo de relaxação ocorre em com dois tempos característicos: um tempo de relaxação voltado ao vetor do campo B_0 denominado tempo de relaxação longitudinal ou T_1 , e no plano ortogonal denominado tempo de relaxação transversal ou T_2 . Esse efeito de relaxação acaba por produzir efeitos elétricos, seguindo a Lei de Faraday, devido a variação do momento magnético polarizado, conforme ilustrado na figura 15.

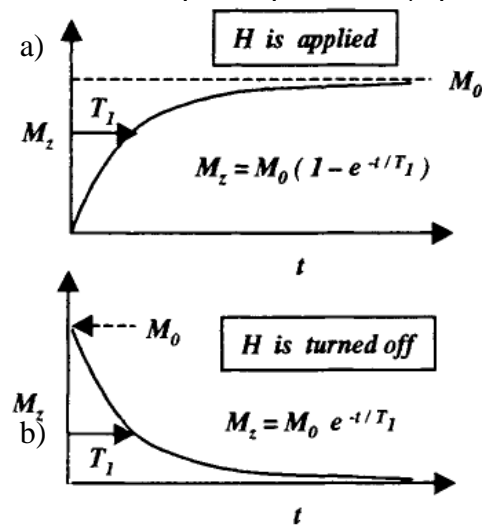
Figura 15 – Magnetização resultante a partir da aplicação de um campo transversal ao campo B_0 .



Fonte: Wikipedia Contributors (2024, nuclear magnetic resonance)

Quanto mais tempo esses *spins* estiverem imersos nesse campo mais eles irão se polarizar e, conseqüentemente, a magnetização crescerá de forma exponencial (33) conforme ilustrado na figura 16.

Figura 16 – Magnetização resultante M_z no eixo “z” a partir da aplicação de um campo externo (H) a) quando o campo é aplicado, b) quando o campo é desligado.



Fonte: Dunn *et al* (2002, p. 18).

$$M_z(t) = M_0 \left(1 - 2e^{-\frac{t}{T_1}} \right) \quad (33)$$

Por exemplo, se estive relacionado a medição da magnetização paralela ao campo, o tempo característico ocorre logo quando o tempo (t) é igual ao tempo (T_1), com $3T_1$ a magnetização é 95% de (M_0), figura 16.

A medição do tempo de relaxação T_1 é, geralmente, mais demorada, uma vez que necessita da medição da variação da magnetização ao longo do eixo do campo aplicado, por isso é mais comum o uso da magnetização transversal ao campo (T_2), que descreve a perda de coerência dos *spins* no plano ortogonal ao campo magnético, necessitando menos tempo para sua aquisição.

2.3.2. Relaxação magnética nuclear

A Lei de Faraday descreve a geração de corrente elétrica em um material condutor devido a um campo magnético variável. Sendo assim, o instrumento de medição da RMN mede a variação da corrente elétrica, ocasionada pela relaxação magnética nuclear, que varia com o tempo. Essa variação de corrente ocorre nos eixos perpendiculares (T_2) e paralelo (T_1) ao campo B_0 .

A relaxação longitudinal T_1 ocorre quando os prótons do material tendem a se polarizar com o campo B_0 , desta forma, os prótons perdem energia para o meio e retornam ao estado de equilíbrio térmico. Já a relaxação transversal T_2 ocorre com e sem a transferência de energia, uma vez que envolve a perda de coerência dos *spins* no plano perpendicular ao campo B_0 . Essa perda de coerência faz com que o tempo de relaxação T_2 ocorra mais rapidamente que a relaxação T_1 .

Os prótons possuem diferentes tempos de relaxação e, quando estão confinados em um ambiente restrito (figura 17), esses tempos sofrem diferentes influências. Por exemplo, em um ambiente poroso o tempo de relaxação T_1 sofre influência tanto dos prótons no volume do fluido ($T_{1\text{ bulk}}$) como da interação dos prótons com a superfície do poro que comporta os prótons ($T_{1\text{ surface}}$). Neste mesmo ambiente o tempo de relaxação T_2 sofre influência dos prótons no volume do fluido ($T_{2\text{ bulk}}$), da superfície do poro que comporta os prótons ($T_{2\text{ surface}}$) e da difusão dos *spins* em um campo heterogêneo ao longo do meio ($T_{2\text{ diffusion}}$).

Sendo assim $T_{1,2\ bulk}$ é dada pela equação (34) no caso da água, $T_{1,2\ surface}$ dada pela equação (35) e $T_{2\ diffusion}$ dada pela equação (36) (Coates, 1999):

$$T_{1,2\ bulk} = 3 \frac{T_k}{298\eta} \quad (34)$$

$$T_{1,2\ surface} = \rho_{1,2} \left(\frac{S}{V} \right) \quad (35)$$

$$T_{2\ diffusion} = D \frac{(\gamma G \tau)^2}{12} \quad (36)$$

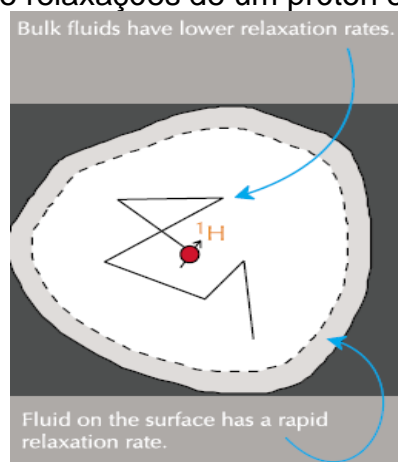
Onde T_k é a temperatura em Kelvin (K), η sendo a viscosidade do fluido (cp), $\rho_{1,2}$ como sendo a relaxatividade superficial nas direções da relaxação, S/V a superfície específica do poro (1/cm), D como sendo o coeficiente de difusão molecular, G a força do gradiente de campo (G/cm), τ como sendo o espaçamento de medição usado para medir utilizando a sequência CPMG, que será discutida no tópico seguinte.

Isto posto, pode-se obter uma equação mais geral para cada uma das relaxações, sendo elas apresentadas pelas equações (37) e (38):

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_{1\ bulk}} + \frac{1}{T_{1\ surface}} \quad (37)$$

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{2\ bulk}} + \frac{1}{T_{2\ surface}} + \frac{1}{T_{2\ diffusion}} \quad (38)$$

Figura 17 - Tipos de relaxações de um próton em ambiente poroso.



Fonte: Coates (1999, p. 50).

2.4. Métodos de aquisição

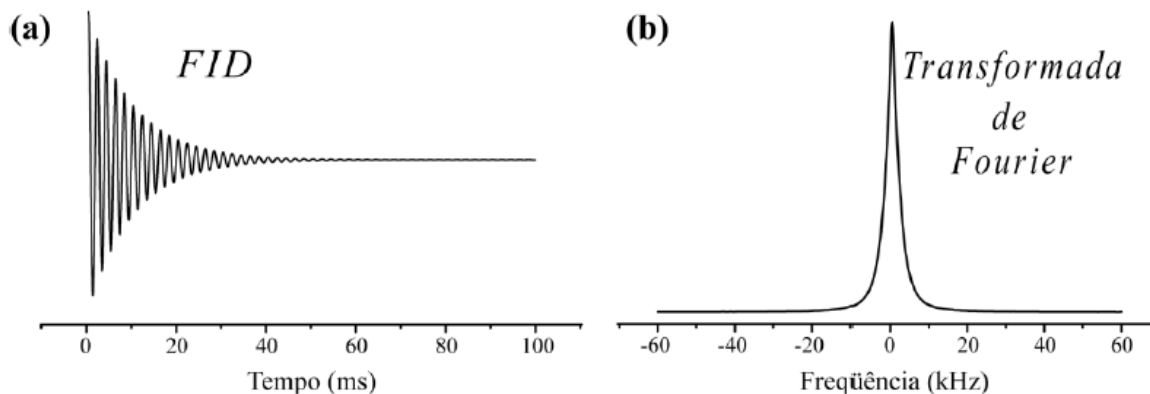
A aquisição dessas informações é realizada com diferentes abordagens, que dependem tanto pelo tipo de relaxação que estamos interessados e das propriedades que se deseja avaliar. Todavia esses métodos diferem nas maneiras como se aplicam os pulsos ortogonais ao campo B_0 . Cada pulso dá uma resposta diferente, como o Decaimento de Indução Livre (FID) e o Spin-Echo (SE) (Hahn, 1950). A partir dessas respostas foram elaboradas sequências de pulsos para aquisição dos dados, sendo a mais como para obtenção do T_1 a sequência de Inversão-Recuperação (IR), e para obtenção do T_2 a sequência Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) (Carr e Purcell, 1954; Meiboom e Gill, 1958).

A sequência de aquisição FID (figura 18) é realizada no intuito de medir o tempo de relaxação, ou a diminuição da magnetização, após aplicar um único pulso ortogonal ao campo B_0 na frequência de Larmor específica do material a ser estudado. O tempo de decaimento da magnetização é muito rápido, na ordem de microssegundos, e deveria relaxar de acordo com a equação (36). Porém devido a heterogeneidades do campo (ΔB_0) e diferenças de susceptibilidade magnética ($\Delta\chi$) da amostra o tempo de decaimento T_2^* (40). Devido a isso é preciso ajustar a frequência de Larmor para as amostras através de uma Transformada de Fourier desse decaimento, e assim obter uma melhor resposta do material. (Coates, 1999, Souza, 2012).

$$M_{xy}(t) = M_0 e^{-\frac{t}{T_2}} \quad (39)$$

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{1}{T_2 \text{ bulk}} + \gamma \Delta B_0 + \gamma \Delta \chi \Delta B_0 \quad (40)$$

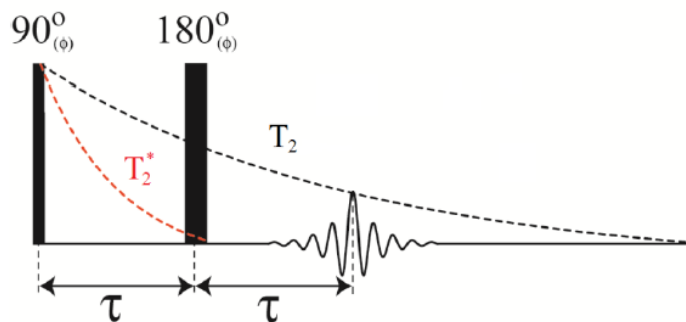
Figura 18 - a) Aquisição do sinal utilizando a sequência FID; b) Transformada de Fourier deste sinal FID.



Fonte: Souza (2012, p. 61).

A sequência SE (figura 19) foi originalmente desenvolvida por Hahn (1950) com o objetivo de contornar as heterogeneidades do campo B_0 . O princípio é que após aplicar um pulso ortogonal ao campo B_0 , os prótons irão precessionar no plano xy, sequência essa igual a FID, espera-se um tempo (τ) e aplica-se outro pulso, também ortogonal ao campo B_0 , porém defasado com o primeiro pulso (180°), espera-se novamente o mesmo tempo τ e mede-se o sinal. Esse sinal medido no tempo 2τ é o eco-spin.

Figura 19 - Aplicação de pulsos para obter o eco-spin em 2τ .



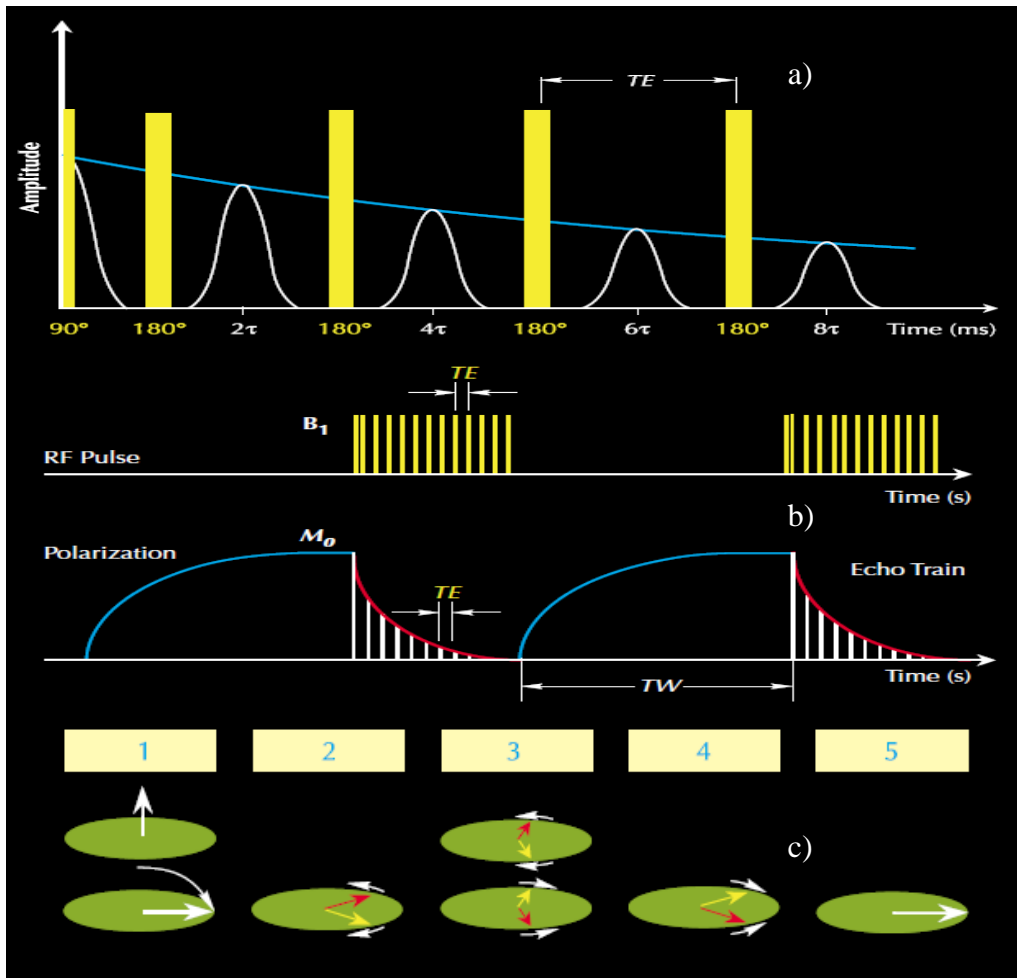
Fonte: Souza (2012, p. 63).

A técnica SE foi modificada por Carr e Purcell (1954) com o intuito de diminuir o tempo total de aquisição e diminuir as imperfeições instrumentais, como a heterogeneidade do campo. Posteriormente, Meiboom e Gill (1958) alteraram a forma como aplicam-se os pulsos de 180° , eles propuseram aplicar um pulso de 90° em relação a um eixo apenas sendo 90° após a aplicação do primeiro pulso, com isso foi possível a diminuição dos erros resultantes de imperfeições dos pulsos aplicados, aumento a precisão da sequência e, conseqüentemente, a fidelidade do tempo de relaxação T_2 . Com isso a sequência ganhou o nome de todos os colaboradores CPMG (figura 20-a).

A sequência CPMG possui alguns parâmetros importantes para calibrar, um deles é o tempo de polarização TW, que é o tempo em que o meio é repolarizado entre aquisições de dados sucessivos, permitindo que sejam realizadas várias aquisições e seja tirada a média, diminuindo assim a razão sinal/ruído. Os demais são o tempo entre os ecos TE que também é representado por τ e a quantidade de ecos a serem medidos (NECH).

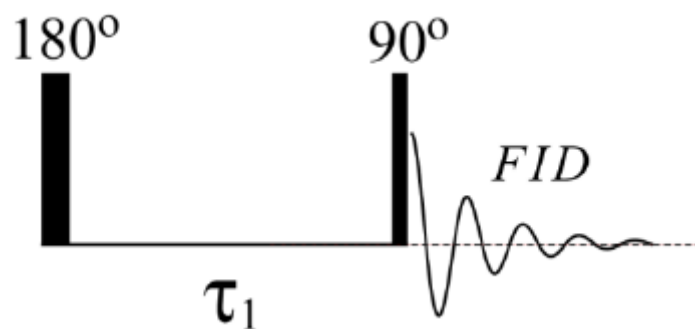
O método mais utilizado para obtenção do tempo de relaxação T_1 são o Inversão de Recuperação (IR), figura 21. A ideia é que não se pode medir a intensidade da magnetização na direção “z”. Sendo assim é feito de maneira inversa para aumentar o intervalo de magnetização, segundo a equação 33. Mas para isso ao invés de gerar um pulso de 90° e depois um outro pulso de 180° , faz-se primeiro o pulso de 180° , pondo os *spins* precessionando na direção contrária ao campo B_0 , depois aplica-se um pulso de 90° para fazer esses prótons irem para uma posição ortogonal ao eixo, e assim medindo então a relaxação saindo do eixo “-z” até o “+z”, indo do eixo negativo de magnetização até o eixo positivo, sendo medido o tempo de relaxação T_1 .

Figura 20 - a) Sequência CPMG vista pela aplicação de pulsos;
 b) Sequência CPMG vista entre as medições completas;
 c) Comportamento dos spins durante a sequência CPMG.



Fonte: Coates (1999, p. 40-42).

Figura 21 - Sequência IR.



Fonte: SOUZA (2012, p. 62).

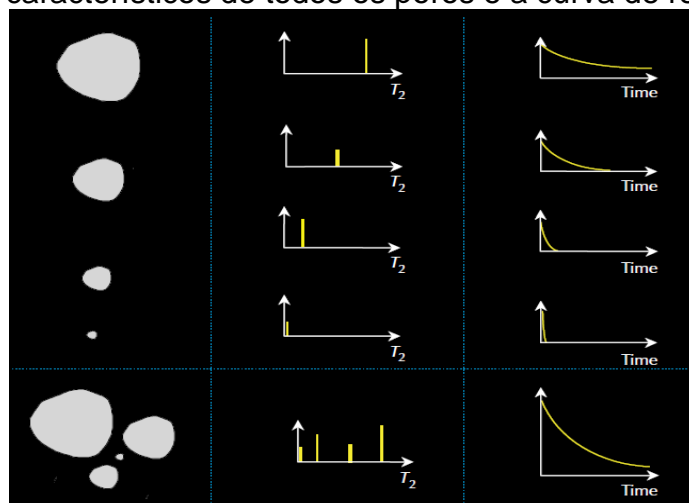
2.5. Aplicações em meios porosos

A interação entre prótons no volume do fluido indica o efeito $T_{2\ bulk}$ (34) no tempo de relaxação, isso pode indicar que quanto mais prótons tiver no fluido, maior é o espaço poroso, ou seja, com um volume de poro preenchido com prótons será maior o tempo de relaxação. Portanto, é possível interpretar que tempos de relaxação mais longos ou mais curtos estão associados ao tamanho do volume poroso que foi preenchido.

Porém todo poro possui além do volume uma superfície de contato, o que introduz o efeito $T_{2\ surface}$ (35). Esse efeito é influenciado pela razão superfície-volume do poro e pela relaxatividade superficial.

Tanto os parâmetros bulk e superfície podem não ser coerentes se houver uma grande influência da difusão do campo ao longo do gradiente do campo. O $T_{2\ diffusion}$ (36) indica uma perda de coerência entre os prótons dentro do poro, ou seja, em rochas onde a matriz possua susceptibilidade magnética muito diferente do fluido saturante. Tais efeitos foram estudados por Korringa *et al* (1962) em óleos diferentes, assim não só é possível obter informações sobre o poro, mas também sobre o fluido saturante e suas características. Mas para contornar esses efeitos em laboratório pode-se usar valores baixos de t na ordem de dezenas ou centenas de microssegundos, associados a um campo B_0 fraco.

Figura 22 – Diferentes tamanhos de poros com água 100% saturada e seu respectivo tempo característico e tempo de relaxação. No final a composição dos tempos característicos de todos os poros e a curva de relaxação.



Fonte: Coates (1999, p. 51).

No caso da medição de RMN temos apenas a curva de decaimento, sendo preciso, portanto, fazer a inversão dessa curva para obter a distribuição T_2 . Para este fim aplica-se a transformada inversa de Laplace para obter essa curva.

Essa operação matemática é conhecida como um problema mal posto, ou seja, pequenas mudanças nas condições iniciais alteram significativamente o resultado, não possuindo também apenas uma única solução. Sendo assim possíveis soluções numéricas para problemas mal postos apresentados por Tikhonov (1963) resultam no incremento de um regularizador.

A partir da distribuição de relaxação T_2 Kenyon *et al* (1988) elaborou modelo que pudesse nos dar com algum grau de confiabilidade os valores de permeabilidade da rocha. O modelo é conhecido como SDR (Schlumberger-Doll Research) (41) leva em conta a média logarítmica dos valores de T_2 obtidos pela curva de distribuição e a porosidade obtidos pela ressonância.

$$k_{SDR} = a T_{2\text{ lm}}^b \varphi_{NMR}^c \quad (41)$$

Onde as constantes “b” e “c” possuem valores 4 e 2 respectivamente, já o valor da constante “a” varia para cada tipo de litologia. O modelo SDR é sensível à presença de óleo e de gás, alterando a distribuição de T_2 e, conseqüentemente, alterando o valor de $T_{2\text{ lm}}$. Por isso, rochas sedimentares distintas bem como porosidades diferentes afetam o modelo. Se for possível obter a permeabilidade das amostras previamente é possível ajustar todas constantes, obtendo assim um melhor resultado.

Outros modelos foram propostos na tentativa de aplicar a ressonância aos estudos de permeabilidade. Timur (1969) associa a permeabilidade ao índice de fluido livre (Free-Fluid Index - FFI), com isso Coates (1998) utiliza-se do FFI e introduz o volume de fluido irreduzível (Bulk Volume Irreducible - BVI). Portanto a porosidade total da amostra é a soma entre o FFI e o BVI (42).

$$\varphi_t = FFI + BVI \quad (42)$$

A partir dessa informação é possível determinar o T_2 que corta esses dois regimes, chamado de $T_{2\text{ cutoff}}$, e sabendo desse valor torna-se possível determinar a

fração de cada regime. Com esses dados, Timur-Coates propôs uma forma diferente de calcular a permeabilidade (43).

$$k_{Timur-Coates} = \left[\left(\frac{\varphi_{NMR}}{a} \right)^2 \left(\frac{FFI}{BVI} \right) \right]^2 \quad (43)$$

2.6. Princípios computacionais

O tratamento dos dados é de fundamental importância para os estudos científicos. Adquirir dados por si só não é suficiente para trazer relevância a um estudo, é preciso processá-lo, a fim de extrair informações distintas, realçar os dados de interesse e então compará-lo com os da literatura.

Os principais processamentos dados neste trabalho são, a transformada de Fourier, a transformada inversa de Laplace dos dados de RMN, a regressão linear para obter os coeficientes dos modelos SDR, e treinamento de modelos de aprendizado de máquina.

2.6.1. Transformada de Fourier

A transformada de Fourier (44) tem o intuito de ver o dado, que inicialmente está no domínio do tempo, no domínio da frequência. Sodré (2003) informa que a transformada de Fourier de uma função no domínio do tempo $h(t)$, é chamada de $H(\omega)$, onde $\omega \in \mathfrak{R}$.

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt \quad (44)$$

Por exemplificar, podemos obter a transformada característica Fourier da função caixa $h(t)$ dada pela equação (45), onde ela está definida para 1 em um intervalo qualquer $(-T, T)$ e 0 fora desse intervalo, assim a resolução da transformada $H(\omega)$ da função $h(t)$ é dada na equação (46):

$$h(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t \in (-T, T) \\ 0 & \text{se } t \notin (-T, T) \end{cases} \quad (45)$$

$$\begin{aligned}
 H(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt = \int_{-T}^T h(t)e^{-i\omega t} dt = \left[\frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega} \right]_{-T}^T = \frac{e^{-i\omega T} - e^{i\omega T}}{-i\omega} \\
 &= \frac{2}{\omega} \left(\frac{e^{-i\omega T} - e^{i\omega T}}{-2i} \right) = \frac{2}{\omega} \text{sen}(\omega T) = 2T \frac{\text{sen}(\omega T)}{\omega T} = 2T \text{sinc}(\omega T)
 \end{aligned} \tag{46}$$

A transformação do sinal FID é feita pelo software acoplado ao equipamento da RMN, equipamento esse adquirido pelo Laboratório de Propriedades Físicas das Rochas-UFRN (LPFR-UFRN).

2.6.2. Transformada de Laplace

A transformada de Laplace (47) foi estudada por Oliver Heaviside que percebeu a facilidade de transformar Problemas com Valores Iniciais em equações algébricas (Sodré, 2002). Sendo assim, ela é muito semelhante a transformada de Fourier, tendo a diferença em seu expoente, onde “ $i\omega$ ”, que representa a frequência no eixo imaginário na transformada de Fourier, é substituído por “ s ”, dando à solução não só uma componente imaginária e sim o plano imaginário, e, portanto, mais geral:

$$H(s) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{-st} dt \tag{47}$$

Isso dá à transformadas mecanismos de resoluções mais dinâmicas, com equações diferenciais, estabilidade de sistema, entre outros problemas. Por exemplo a transformada de Laplace de uma função degrau $f(t)$ dada pela equação (48), é realizada seguindo a equação (49):

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t \geq 0 \\ 0 & \text{se } t \leq 0 \end{cases} \tag{48}$$

$$\begin{aligned}
 L[f(t)] = H(s) &= \int_{-\infty}^{\infty} (t)e^{-st} dt f = \int_0^{\infty} e^{-st} dt = \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^M e^{-st} dt = \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\frac{e^{-sM}}{-s} - \frac{1}{-s} \right] = \frac{1}{s}
 \end{aligned} \tag{49}$$

No caso da RMN queremos obter a melhor frequência de ressonância do próton, para isso se excita o próton através da sequência FID em uma frequência próxima da de ressonância e aplica-se a transformada no dado adquirido para obter a melhor frequência de ressonância naquele momento.

A partir da sequência CPMG se obtém uma curva exponencial no domínio “s” e aplicando a transformada inversa de Laplace, torna a função no domínio do tempo. Algumas técnicas matemáticas são utilizadas para realizar essa inversão.

Segundo Dunn *et al* (2002) o problema da inversão da curva de relaxação é que pequenas variações nas condições de contorno apresentam resultados bem diferentes e, portanto, apresenta-se como um problema mal posto (TIKHONOV, 1963). A solução é utilizar um coeficiente de normalização “ α ” que deixe a função inversa com um aspecto mais “amigável”. Sendo assim, o intuito da transformada inversa é ajustar a curva obtida pela curva de relaxação através de uma função algébrica, que será a distribuição de relaxação T_2 . Essa função algébrica deverá ser semelhante a uma somatória de exponenciais (50).

$$g_i = \sum_{i=1}^N \alpha_i f_i e^{-\frac{t_j}{T_i}} + e_j, \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (50)$$

Esta função $f(t)$ recebe os dados de entrada da curva de relaxação, onde “i” são a quantidade de pontos específicos da distribuição e “j” são a quantidade de pontos obtidos na curva de relaxação. Os coeficientes e_j é utilizado para minimizar o erro, t_j são os valores do tempo na curva de relaxação e T_i são os valores do da curva de distribuição que são pré-selecionados em uma escala logarítmica. O valor de f_j é considerado a porosidade parcial que os poros possuem de acordo com o tempo observado, assim está associado ao T_i . O fator de polarização α_i (51):

$$\alpha_i = 1 - e^{-\frac{RD}{T_j}} \quad (51)$$

Essa função considera o tempo de repetição entre os pulsos de excitação (RD) influenciada pela contribuição dos poros com um tempo de relaxação T_j específico, que por sua vez estão associados à porosidade parcial f_i . Portanto, ela ajuda a modelar como a repetição de excitações, feitas pela sequência CPMG, afeta a resposta da amostra com diferentes tamanhos de poros em diferentes tempos de relaxação.

2.6.3. Regressão linear

A regressão linear é uma análise estatística para identificar a correlação entre variáveis independentes e dependentes. A ideia é identificar a função linear, ou seja, uma função cuja taxa de variação seja constante que melhor se ajusta às variáveis a serem estudadas. De maneira genérica pode-se afirmar que um modelo de função linear é dado pela equação (52), que pode ser posta em forma vetorial (53):

$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n \quad (52)$$

$$\hat{y} = h_\theta(x) = \theta^T X \quad (53)$$

Matriz θ^T é composta por uma matriz com os valores de $[\theta_1 \theta_2 \theta_3 \dots \theta_n]$ e a matriz X possui os valores dos dados de cada incógnita em um dos eixos e noutro eixo o valor de θ_0 . Uma das soluções mais comuns é utilizar o ajuste pelo Método dos Mínimos Quadrados. A solução para esse método é dada na equação (54) em sua forma matricial:

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} * X^T y \quad (54)$$

Para exemplificar farei um exemplo para o caso de apenas uma incógnita. Inicialmente temos um conjunto de dados obtidos do eixo x e do eixo y, e estamos tentando afirmar que há uma relação entre eles. A lista com os dados do eixo x e y estão abaixo:

$$x = [2 \ 5 \ 5,2 \ 10]; \ y = [-1 \ 2 \ 6 \ 7]$$

A matriz X é composta pela lista x e os valores de θ_0 , porém ainda não temos esse valor, então se coloca o valor de 1 em toda a lista ficando:

$$X = [(1 \ 2)(1 \ 5)(1 \ 5,2)(1 \ 10)]$$

Onde:

$$X^T X = [(4 \ 22,2)(22,2 \ 156,04)]$$

$$(X^T X)^{-1} = [(1,188 \ -0,169)(-0,169 \ 0,0305)]$$

$$X^T y = [14 \ 109,2]$$

E, portanto, o melhor ajuste como sendo:

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} * X^T y = [-1,825 \ 0,9595]$$

Neste caso a solução de θ_0 é $-1,825$ e θ_1 é $0,9595$. Essa operação matemática precisa ser verificada e confirmada para vermos se ela satisfaz o resultado. Essa verificação é chamada de função de erro. A mais comum utilizada em sistema lineares é o Erro Quadrático Médio (MSE) (55):

$$MSE(h_{\theta}(x), y) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\theta^T x^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (55)$$

O cálculo do erro MSE no exemplo acima foi de $2,69$. Um erro considerável para tão poucos pontos. Neste caso em específico, é preciso mais pontos para um bom ajuste, sem que haja muitos pontos fora da curva do ajuste (*outliers*).

No caso do modelo SDR a variável dependente “y” seria a permeabilidade, que dependem das variáveis independentes “X”, sendo elas a média logarítmica do tempo T_2 e da porosidade medida na ressonância ϕ_{NMR} .

O primeiro impasse é que as incógnitas estão nos expoentes dos valores. Para contornar isso pomos os valores na escala logarítmica (56):

$$\log(k_{SDR}) = \log(a) + b * \log(T_{2 \text{ lm}}) + c * \log(\phi_{NMR}) \quad (56)$$

Dessa forma é possível obter os valores de a, b e c se tivermos obtido os valores de permeabilidade de outra maneira. Importante ressaltar que o valor de “a” é obtido quando se eleva o $\log(a)$ pelo expoente da base do log.

2.7. Aprendizado de máquina

Segundo Samuel (1959) o aprendizado de máquina é um campo da inteligência artificial que procura encontrar algoritmos e técnicas que permitam com que sistemas computacionais realizem determinadas tarefas sem serem previamente programadas para isso. O objetivo é fazer com que a máquina reconheça padrões de um banco de dado, e a partir deles classifique ou preveja novos resultados a partir de novos dados.

Apesar da ideia ser antiga a abordagem como a entendemos inicia-se ainda nesse século. Isso foi possível devido à robustez de sistemas computacionais com cada mais rapidez no processamento dos dados e principalmente, a quantidade de

dados armazenados nesses sistemas. Com isso houve mais acessibilidade aos estudos, permitindo que mais pesquisadores e empresas pudessem se aventurar nesse ramo.

Há principalmente 4 maneiras de realizar o treinamento das máquinas sendo elas o treinamento supervisionado, não-supervisionado, semi-supervisionado e aprendizado por reforço.

O treinamento supervisionado todos os dados de entrada, do conjunto de dados de treinamento e de teste, possuem as respostas corretas, rótulos, forçando o modelo a convergir de maneira ótima aos dados de treinamento. Esse método de treinamento é mais utilizado na classificação e regressão, onde os principais modelos de treinamento são: KNN, regressões lineares e logísticas, máquinas de vetores de suporte (SVM), árvores e florestas de decisão e redes neurais (Cunningham *et al.*, 2008, Géron, 2021).

O treinamento não-supervisionado não possui nenhuma resposta dos dados, forçando o modelo de aprendizado de máquina a agrupar as características dos dados de entrada. Tal método é utilizado principalmente no agrupamento dos dados com características semelhantes (clusterização), na visualização e redução de dimensionalidade e detecção de anomalias, onde os principais modelos de treinamento são: clusters por centroide (KMeans) e por densidade (DBSCAN) e análise de componentes principais (PCA) (Greene *et al.*, 2008, Géron, 2021).

O treinamento semi-supervisionado possui alguns dados com respostas e outros não, isso dá aos modelos a capacidade de agrupar características semelhantes e dar respostas satisfatórias a cada conjunto de previsões com base nos rótulos. Tal modelo é utilizado principalmente quando é custoso ou não é possível dar todas as respostas para o conjunto de dados, e o principal modelo de treinamento é a rede neural de crenças profundas (DBN's) (Géron, 2021).

O treinamento por reforço se utiliza de um agente que pune ou dá recompensas ao modelo com base em suas respostas, sendo um modelo não guiado, o que dá ao modelo a capacidade de definir a melhor estratégia, ou seja, definir a melhor política de aprendizado. Esse método é muito utilizado na robótica, no gerenciamento de sistemas e nos treinamentos para jogos, onde os principais modelos de aprendizado são: otimizador de políticas proximal (PPO) e redes neurais por reforço (DQN) (Géron, 2021).

As principais técnicas de última geração para aprendizado de máquina supervisionados utilizam ou decisões baseadas em conjunto de decisões, denominadas de métodos *Ensemble*, ou decisões baseadas em redes neurais artificiais, denominadas *Neural Network* (Sagi e Rokach, 2018; Dong *et al*, 2019).

2.7.1. Ensemble

Os métodos de previsão de resultados que utilizam conjuntos de decisões separadas são estudados a muitos séculos. O matemático francês Marie Jean Antoine Nicolas de Caritat, Marquês de Condorcet (1743-1794) elaborou o teorema do Juri Condorcet em 1785. O teorema apresenta a situação em que um júri tem que decidir se o réu é culpado ou não a partir das decisões independentes de cada eleitor do júri. Observou-se que aumentando a quantidade de eleitores do júri a chance de obter um julgamento justo também é aumentado, indicando que decisões de um grupo podem ser melhor que a decisão de um único julgador especialista. O filósofo e estatístico inglês Sir Francis Galton (1822-1911), que concebeu o conceito básico de desvio padrão e correlação, realizou um experimento em uma feira pedindo aos visitantes que previssem o peso de um boi, centenas de pessoas tentaram e ninguém acertou o peso, porém a média de todos os resultados chegou bem perto do resultado real. Portanto, em determinados casos e circunstâncias a decisão tomadas por um conjunto de eleitores são melhores que a decisão de um único eleitor extremamente especializado.

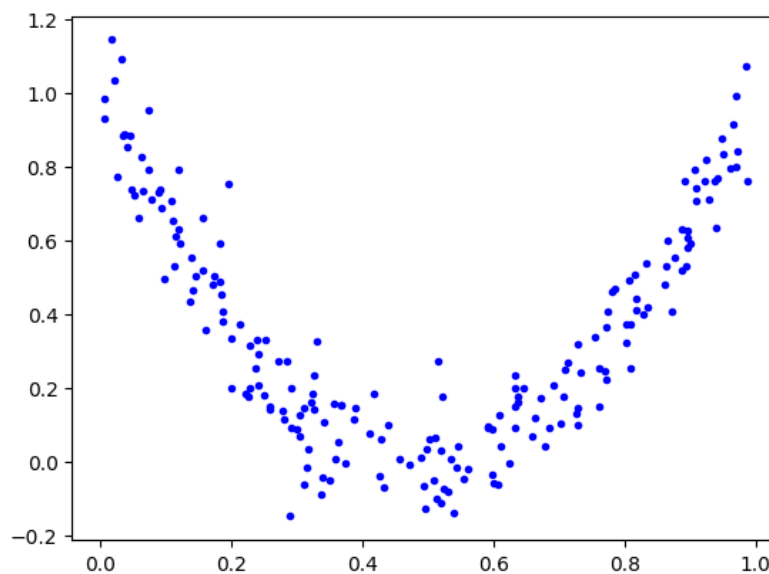
Para o aprendizado de máquina com supervisão Turkey (1977) apresentou a ideia de ajustar um modelo de regressão linear para os dados originais e outro modelo para os resíduos. Schapire (1990) expôs que a combinação de resultados de vários alunos fracos pode superar os resultados de um aluno forte. Breiman (2001) popularizou o modelo de florestas aleatórias como um modelo de previsão supervisionado robusto baseada em decisões independentes. Friedman (2001) elaborou o um aprendizado onde cada decisão depende da decisão anterior, popularizando assim os modelos de aprendizado por gradiente.

2.7.1.1. Random Forest

A florestas aleatórias (Random Forest) são modelos preditivos ou classificatórios de aprendizado de máquina baseados em decisões de árvores. A árvore de decisão é um estilo previsão que divide os dados em possíveis resultados. Em termos gerais a árvore recebe os dados de entrada (*input*) e divide esse dado em repostas, esses são os nós (*nodes*), cada nó possui parâmetros que classificam ou identificam os resultados de entrada e com isso geram uma resposta. Essa resposta pode ir para outro nó, aumentando a possibilidade de repostas, ou ser a resposta final (Sun *et al*, 2022). Caso o nó se conecte com outro nó, ele altera e incrementa mais possibilidades de resposta a partir do dado inicial, e assim terá uma profundidade (*depth*) maior. Quando um nó não se conecta mais com outro nó temos uma resposta, no caso de classificações temos muitas respostas que são pontuáveis ou já no caso da regressão temos apenas uma única resposta. Esse resultado a partir de um nó é chamado de folha (*leaf*).

Para exemplificar vamos utilizar o conjunto de dados aleatórios que simulam uma equação de segundo grau, figura 23. O processo consiste em gerar números aleatórios de x que variam de acordo com uma função de segundo grau.

Figura 23 - Gráfico de dados aleatórios em uma função do segundo grau.

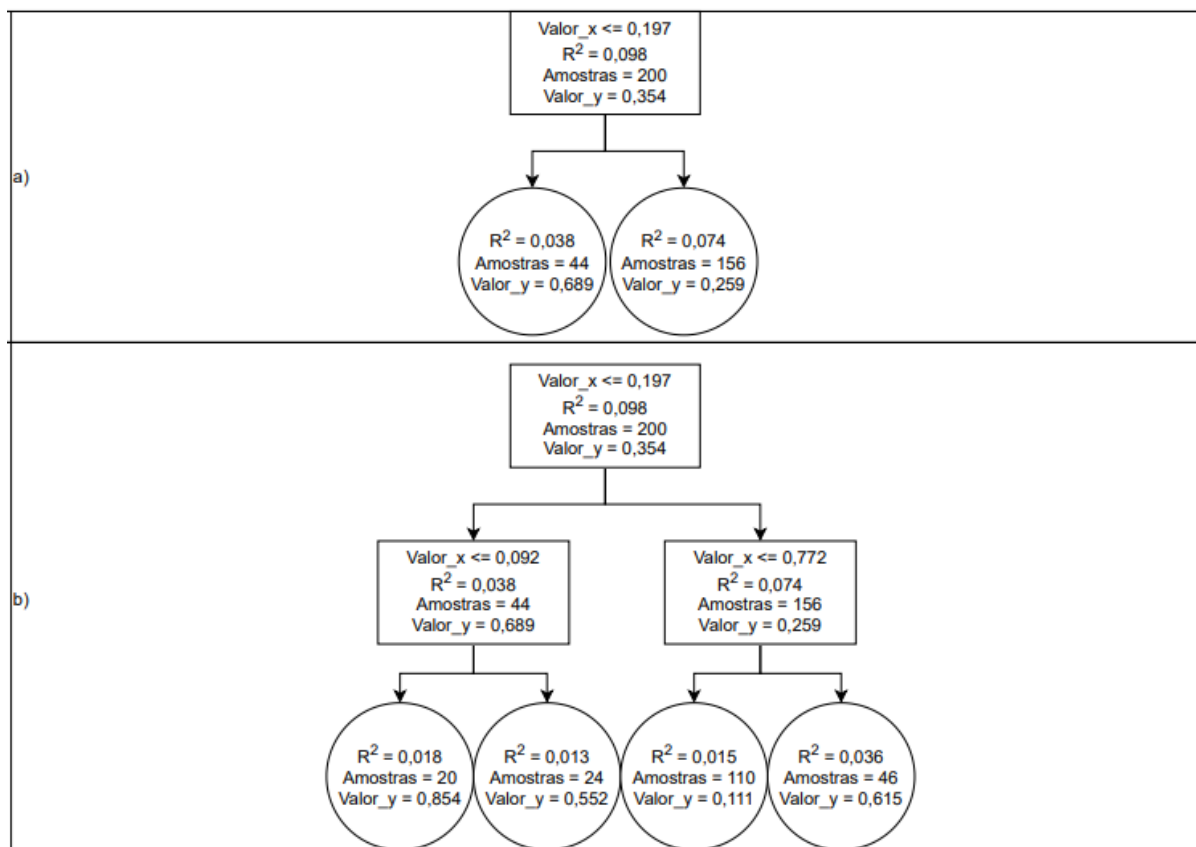


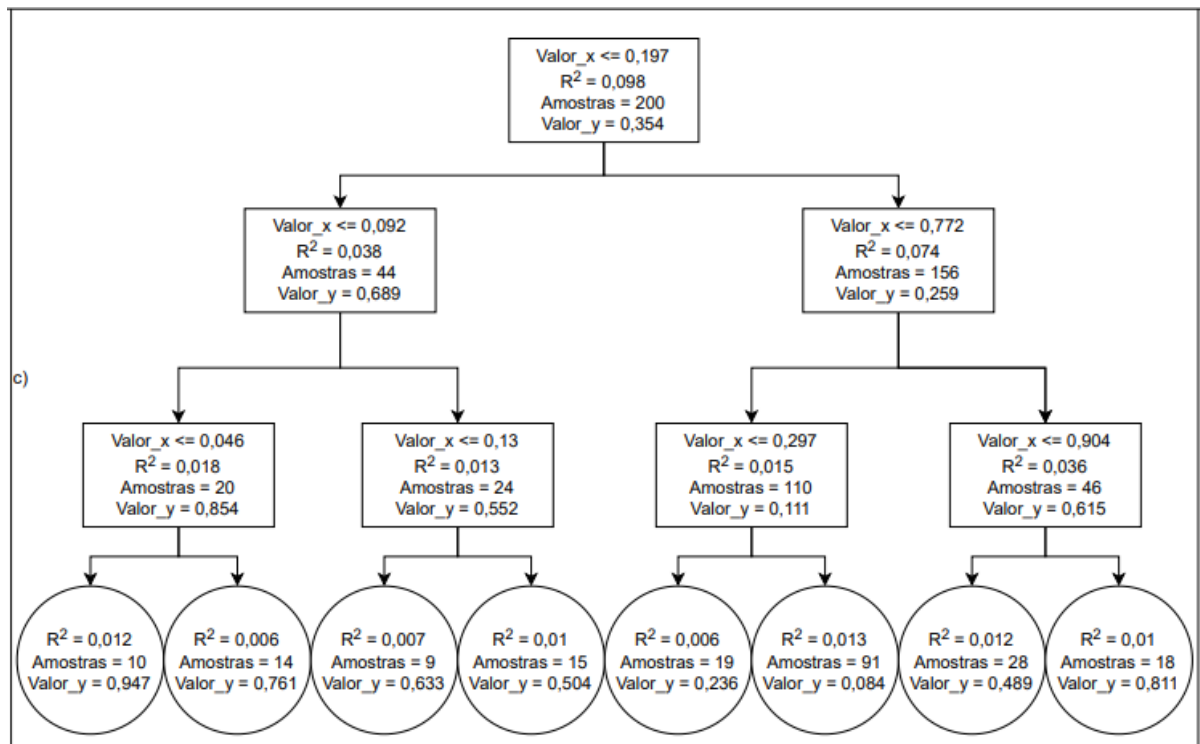
Fonte: Adaptado de Géron (2021).

É perceptível que se trata de uma função do segundo grau, e poderíamos utilizar uma função analítica para ajustar esse gráfico, porém vamos utilizar a árvore de decisão para isso. Para tal é necessário escolher os hiperparâmetros da árvore, a quantidade de nós, a função de regressão, entre outros parâmetros. Vamos utilizar a forma padrão da árvore de decisão disponibilizada pela biblioteca do *Scikit-Learn*, modificando apenas a profundidade máxima (*max_depth*) da árvore. Sendo assim foram elaboradas três árvores, uma com profundidades um, dois e três, respectivamente, figura 24. (Pedregosa *et al*, 2011)

Neste caso temos três árvores de decisão, onde cada uma possui mais respostas no final. Percebemos que o critério de divisão é o erro quadrado (*squared_error*), é a partir desse critério que a árvore toma sua decisão. O comportamento dessas árvores é observado na figura 25.

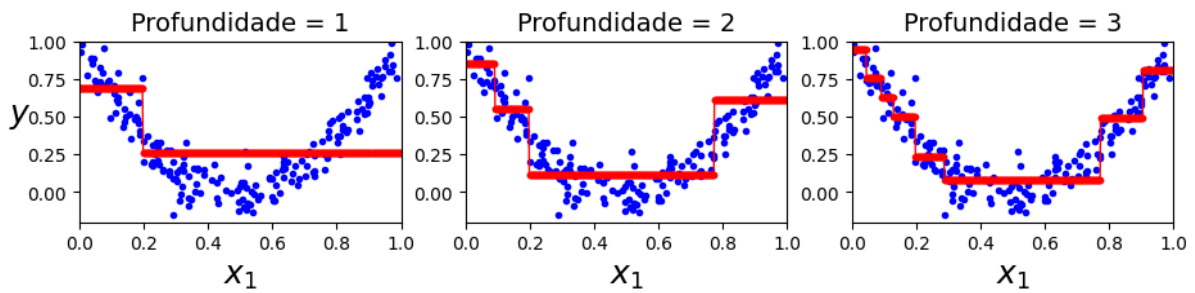
Figura 24 - Árvores de decisão cirandas. a) Apenas um nó; b) Dois nós; c) Três nós.





Fonte: Elaborada pelo autor (2024).

Figura 25 - Respostas das árvores de decisão baseada em sua profundidade.



Fonte: Adaptada de Géron (2021).

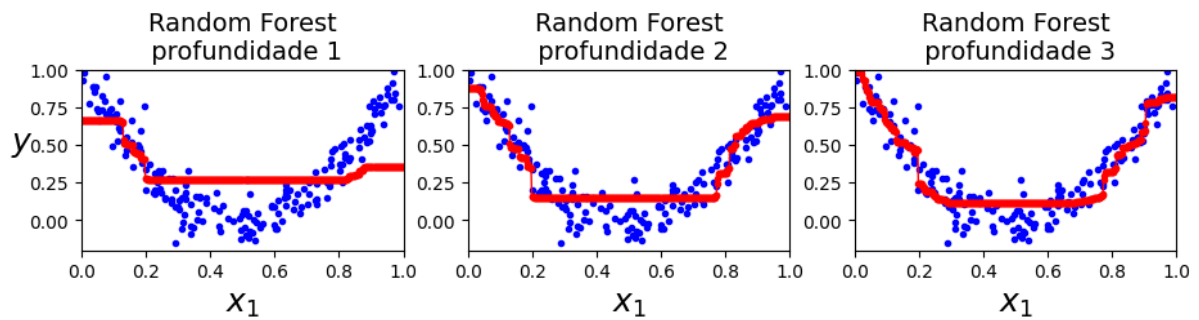
A partir da profundidade pode-se obter curvas que se ajustam melhor ou não aos dados iniciais. Observa-se que com profundidade igual a um tendo apenas duas respostas, a árvore de decisão ajustou para si duas retas, no caso da profundidade igual a três, com oito respostas finais diferentes, obteve-se um ajuste visual melhor. Para obtermos a real eficiência o erro MSE das árvores com profundidade 1, 2 e 3 são respectivamente *0.066*, *0.019*, *0.011*.

As Florestas Aleatórias são diversas árvores de decisões com variações aleatórias, podemos dizer que são árvores não podadas. Este modelo consiste em utilizar diversas árvores mais “fracas” para prever o resultado mais convincente.

A árvore de decisão é considerada um modelo caixa branca, pois todos os ajustes podem ser feitos pelo programador, já as florestas aleatórias, são consideradas caixas pretas, pois o programador não tem controle de como cada árvore é construída, apenas tem o controle dos hiperparâmetros. Isso é feito de propósito, para que não haja um viés de interpretação dos dados, uma vez que o modelo permite encontrar padrões que o programador possivelmente não consideraria. Sendo assim, não sabemos como e nem o porquê que a floresta aleatória decide por alguma resposta.

Aplicando os mesmos dados da função de 2º grau a 3 florestas aleatórias com 100 árvores cada, onde cada árvore possui no máximo 1, 2 e 3 nós, obtém-se a seguintes curvas ilustradas na figura 26, e com erros *0.054*, *0.015*, *0.01* respetivamente.

Figura 26 - Respostas das florestas aleatórias baseadas em sua profundidade



Fonte: Adaptada de Géron (2021).

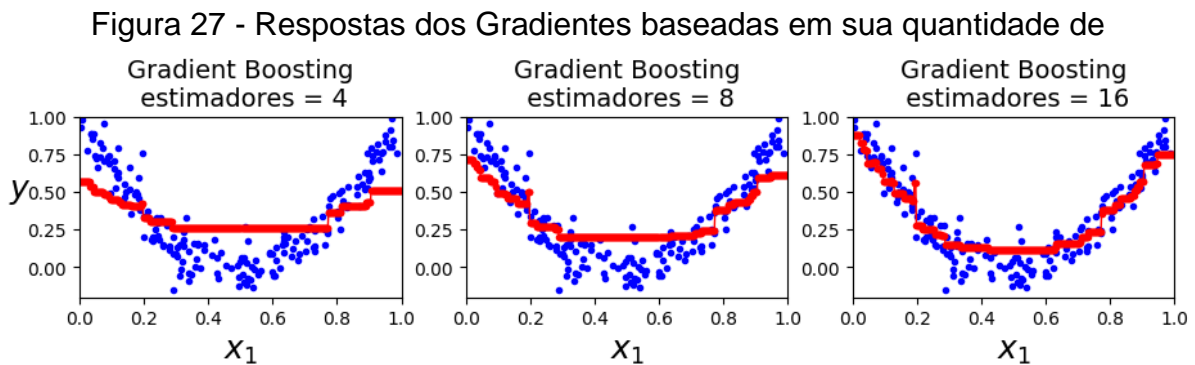
2.7.1.2. Gradient Boosting

De maneira semelhante a árvore de decisão pode ser comparada a um aluno. Se temos uma turma de alunos fracos e fazemos uma pergunta a eles, a suposição é que a média das respostas desses alunos fracos se aproximem mais da verdade do que a resposta de cada um individualmente. Em uma proposta binária um aluno fraco acerta 50% das vezes, em uma adivinhação aleatória, e um aluno forte seria um aluno com acerto quase perfeito, acima de 95% por exemplo. Como seria então construir alunos fortes sem a necessidade de construir toda a linha de raciocínio por parte do pesquisador? A partir dessa dúvida criou-se o conceito de boosting, que tenta realizar o aprendizado de um aluno forte a partir de um aluno fraco, que é constantemente melhorado (Mayr *et al*, 2014).

O aprendizado do aluno fraco não é realizado chamando este aluno no mesmo conjunto de dados, isso não alteraria sua “percepção” do problema que ele tem que resolver. Portanto, é realizado uma manipulação dos dados de treinamento para que a partir de determinadas combinações o aluno fraco vá “percebendo” nos dados aqueles conjuntos que são mais difíceis de prever, e ao longo das interações, os padrões se tornem mais proeminentes.

Esse estilo de aprendizado utiliza também as mesmas construções de decisões das árvores, porém muda-se os parâmetros de gradiente que é utilizado para avaliação das respostas e utilização dos subconjuntos dos dados de treinamento.

Aplicando os mesmos dados da função de 2º grau neste modelo de Gradiente com quantidade de 4, 8 e 16 estimadores é possível obter as seguintes curvas ilustradas na figura 27, e com erros 0.048, 0.026, 0.011 respectivamente.



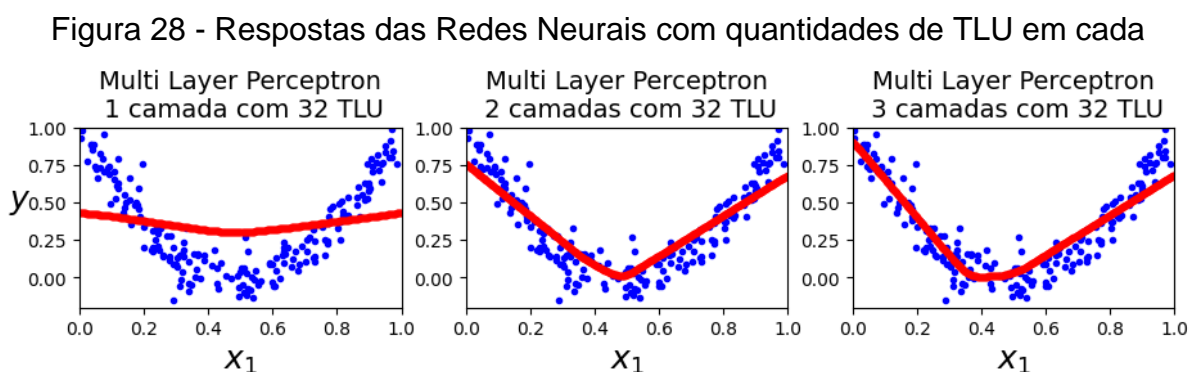
2.7.2. Neural Network

Há muito tempo se estuda a forma como o cérebro toma as decisões. Desde a percepção do neurônio, e sua característica de se conectar e ativar de forma única, os estudiosos propuseram uma forma análoga de fazer com que os computadores tomassem as suas decisões neste mesmo formato. Surge então as Redes Neurais Artificiais a partir de um estudo do neurofisiologista Warren McCulloch (1898-1969) e do matemático Walter Pitts (1923-1969), que propuseram um modelo computacional neural de maneira simplificada, a partir de neurônios artificiais (McCulloch e Pitts, 1943), onde os neurônios recebem um ou mais dados de entrada binários e uma saída binária. O psicólogo Donald Olding Hebb (1904-1985) propõe a lei de Hebb informando que a intensidade das conexões neurais é variável, sendo essa variabilidade a base do aprendizado e da memória (Hebb, 1949). A partir dessa percepção o psicólogo Frank Rosenblatt (1928-1971) propõe o neurônio artificial utilizado até o momento, denominada ou de *unidade lógica de limiar* (TLU) ou de *unidade de limiar linear* (LTU), que recebe valores numéricos ao invés de binários, e possui sua ativação a partir de uma função, e cada conexão está associada a um peso. O perceptron é denominado como uma rede neural formada por uma única TLU ou LTU (Wu e Feng, 2017, Géron, 2021).

Mas realizar o treinamento de uma rede neural, que a saber é a obtenção dos pesos de cada neurônio, é uma tarefa difícil, se não impossível para os métodos utilizados até o trabalho publicado por David Rumelhart, Geoffrey Hinton e Ronald Williams, que propõe um aprendizado retropropagado, que é realizado através do ajuste dos pesos e vieses de cada TLU automaticamente (Rumelhart e Zipser, 1985). Para tal, basta que haja o cálculo do gradiente de erro (forward) após os dados passarem pelos perceptrons e que o algoritmo realize os ajustes finos desses valores a fim de diminuir o erro de trás para frente (backward pass), esse processo de cálculo do erro e ajuste dos pesos é realizado até que haja uma convergência das previsões da rede neural com a solução esperada.

Apesar de termos esse conhecimento a bastante tempo, quase 4 décadas, muitos outros modelos de aprendizado de máquina foram mais bem avaliados, pois o treinamento de uma rede neural é um processo lento. Além disso apenas com o trabalho de Geoffrey Hinton *et al* (2006), que participou como coautor do trabalho de aprendizado por retropropagação, que a rede neural profunda ou rede neural com múltiplas camadas obteve sua popularidade. Os modelos que utilizam múltiplas camadas são denominados MLP (Multi Layer Perceptron) e conseguem se ajustar a quase todo problema observado até o momento.

Aplicando os mesmos dados da função de 2º grau no modelo de Perceptrons em Múltiplas Camadas, sendo modelos com 1, 2 e 3 camadas, onde cada camada contém 32 TLU's e sendo realizadas 128 processos de retropropagação para ajustes das TLU's, obtém-se as seguintes curvas ilustradas na figura 28, com erros 0.76, 0.020, 0.015 respectivamente.



Fonte: Adaptada de Géron (2021).

3. MATERIAIS E MÉTODOS

Este capítulo apresentará de maneira abrangente os materiais utilizados e os métodos empregados na coleta de dados para esta dissertação. Será fornecida uma análise do material de interesse, a rocha carbonática, abordando sua localização, contextos geológicos relevantes e os equipamentos adotados para a aquisição de dados de petrofísica básica. Em seguida será mostrado em detalhes os parâmetros utilizados no equipamento de RMN com os quais foram obtidos os dados petrofísicos avançados. Por fim, será elucidado os hiperparâmetros empregados no treinamento do modelo de aprendizado de máquina, destacando as configurações específicas utilizadas para otimizar o desempenho do modelo. Essa seção é crucial para compreender como o aprendizado de máquina foi aplicado aos dados coletados, proporcionando um melhor entendimento sobre a escolha estratégica de configurações para garantir resultados precisos e generalizáveis.

Em resumo, este capítulo servirá como um guia detalhado dos elementos fundamentais envolvidos na coleta e processamento dos dados, oferecendo uma visão abrangente e transparente dos métodos utilizados ao longo da pesquisa. Esse entendimento profundo é essencial para validar a robustez dos resultados apresentados e para permitir a replicação e extensão do trabalho por pesquisadores interessados no mesmo campo de estudo.

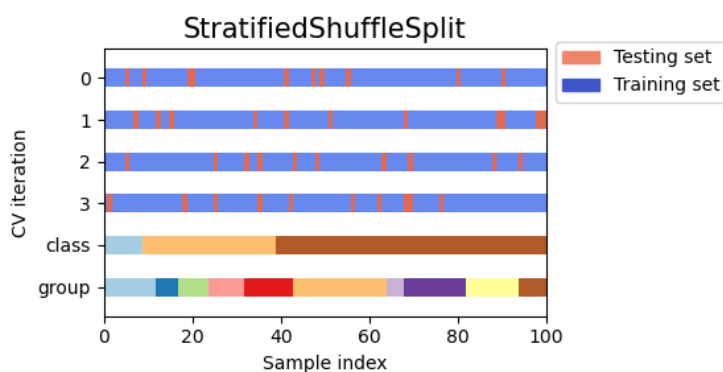
3.1. Amostras carbonáticas e petrofísica básica

As amostras coletadas fazem parte do trabalho iniciado por Lopes, com o objetivo de entender o desenvolvimento dos reservatórios em ambientes cársticos. Foram realizados quatorze poços de dez metros cada, e retirados *plugs* com espaçamento de vinte centímetros sempre que possível. Para este trabalho foram utilizadas 494 *plugs* cilíndricos, de altura máxima 50 milímetros e diâmetro com 25 milímetros, retirados dos testemunhos dos poços (Lopes *et al*, 2023). Desses *plugs* foram identificados quatro litofácies, caracterizadas por Lopes, sendo elas Bioturbiditos, Dolowackstone, Grainstone e Brechado.

Os dados de petrofísica básica foram obtidas através do equipamento Coreval instalado no Laboratório de Engenharia de Reservatórios de Petróleo (LABRES-UFRN), que obtém os valores de porosidade e permeabilidade através da injeção de gás, no caso Nitrogênio, em uma câmara onde está o *plug*. A medição da permeabilidade é corrigida pelo fator de Klinkenberg para se obter um valor mais precisos de permeabilidade para as condições do reservatório.

É necessário separar as amostras em dois grupos, um para treino e outro para teste. Essa separação foi realizada aleatoriamente através do método de seleção *Stratified Shuffle Split*, figura 29, disponibilizado pela biblioteca *Scikit-learn*. Este modelo leva em conta a separação dos dados baseada em um grupo de dados semelhantes. Nesta dissertação os grupos foram as litofácies, uma vez que se sabe que as litofácies podem interferir na permeabilidade, e assim, a seleção manual ou simplesmente aleatória, sem identificação de uma determinada litofácia, poderia atrapalhar o resultado. Sendo assim, 70% dos dados de cada litofácies foi utilizada para treino e 30% para teste, totalizando 394 amostras para treino e 150 para teste.

Figura 29 - Representação modelo de seleção.



Fonte: Pedregosa *et al* (2024, 3.1. Cross-validation: evaluating estimator performance)

3.2. Ressonância magnética nuclear

O sinal adquirido através da técnica de RMN utiliza a ressonância dos núcleos dos hidrogênios presentes nas moléculas de água que preenchem os poros das rochas, com esse sinal é possível obter dados de porosidade e modelar a permeabilidade. Esses dados são comparados com os resultados obtidos através da

porosidade e permeabilidade a gás. Para comparar corretamente se faz necessário realizar a medição do volume e preparar as amostras para garantir uma boa saturação. Em seguida é realizada a calibração do equipamento de RMN e realizada a medição dos dados das amostras.

Medições laboratoriais são relevantes para as diversas etapas na coleta dos dados. A medição do volume serviu para validação dos dados de porosidade e permeabilidade a gás, que já haviam sido adquiridas antes da elaboração desse projeto. O equipamento de RMN calcula a porosidade através do volume, então esse valor é de extrema relevância. Calcula-se o diâmetro (d) e a altura (l) em milímetros para cada *plug*, e a partir desse valor obtém-se o volume em mililitros (ml) através da equação 57.

$$V = \frac{\pi \cdot d^2 \cdot l}{4} \quad (57)$$

A saturação dos poros com água é outra etapa essencial para uma boa aquisição de dados de RMN. Foi realizado a saturação completa com água salobra, com proporção de 20.000 p.p.m de Cloreto de Potássio (*KCl*), esse procedimento visa simular as condições de poço e evitar o inchamento de possíveis argilas presentes na amostra, que eventualmente diminuirá a porosidade. Em seguida realiza-se a descompressão das amostras com uma bomba à vácuo com capacidade de 70 cmHg com o intuito retirar o ar dentro dos poros a fim de diminuir a presença de bolhas no interior dos poros durante a saturação. As amostras são saturadas com a água salobra enquanto estão submetidas à pressão negativa e são deixadas saturar por mais 3 dias nesta mesma solução. Em seguida as amostras foram preparadas para as medições no equipamento de RMN envoltas em fita PTFE (teflon) para que a água não escorresse durante a medição.

Os dados de RMN foram obtidos com o uso do equipamento MesoMr12-060H-I (Niumag), instalado no LPFR-DGEF-UFRN. O primeiro passo consiste em identificar a melhor frequência de Larmor através da sequência FID, e sempre é realizado com a amostra padrão com maior porosidade a cada turno de trabalho, aproximadamente a cada 4 horas. Em seguida se realiza uma calibração com amostras que possuem volumes e porosidades bem determinadas. Este procedimento é realizado com cinco amostras com porosidade 1, 5, 10, 20 e 30 por

cento e com volume de 30 ml, todas fornecidas pela fabricante. Essa calibração é realizada uma vez por semana.

A calibração é realizada seguindo a sequência CPMG, esses resultados geram um gráfico linear, onde o eixo das coordenadas está o valor do sinal obtido na calibração e no eixo das abscissas está o valor da porosidade. É a partir da comparação do sinal obtido de uma amostra a ser estudada com a reta de calibração que se é possível obter a porosidade da amostra.

Os parâmetros de aquisição de dados que utiliza a sequência CPMG, figura 30, utilizadas nesta dissertação se destaca a banda de frequências recebidas pelo equipamento (SW), o tempo de espera entre um eco e outro (TE) a quantidade de ecos medidos ($NECH$), o tempo de espera entre uma aquisição e outra (TW (ms)) e o número de aquisições de uma mesma amostra (NS). Outro parâmetro foi relevante que é um ganho de sinal com relação ao ruído (PRG), mas este é um parâmetro utilizado apenas pelo equipamento da Niumag.

Figura 30 - Parâmetros escolhidos pelo autor para aquisição dos dados.

SEQ	CPMG	SW(kHz)	125
SF(MHz)	12	RFD(ms)	0.080
O1(Hz)	273306.28	RG1(dB)	20.0
P1(us)	6.20	DRG1	3
TD	900016	DR	1
PRG	1		
TW(ms)	10000.000	NS	16
P2(us)	12.40		
TE(ms)	0.400		
NECH	18000		
Peak Offset(ms)	0.0000		
PhaseCount	1		

Fonte: Elaborada pelo autor.

A sequência CPMG nos gera uma curva de relaxação, e é por ela que o software do equipamento *Data Analysis* realizada a transformada de Laplace para obter a curva de distribuição de relaxação T_2 . Essa transformada foi realizada com 128 pontos em um intervalo logarítmico que varia de 0,01 a 10.000 milissegundos.

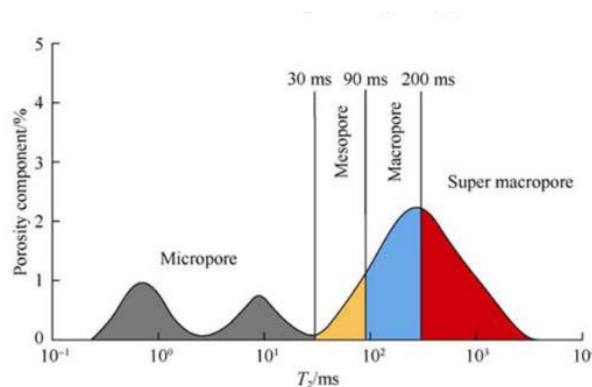
O sinal exportado pelo equipamento, tanto da curva de relaxação, como da curva de distribuição de relaxação T_2 varia de acordo com o sinal calibrado. Por isso

os dados precisam ser normalizados. O princípio é converter o sinal em cada ponto da curva (S_i), na porosidade associada aquele ponto (φ_i), sendo assim, como a área abaixo da curva de distribuição ($\sum S_i$) é a porosidade total (φ_{RMN}) obtida pela RMN, é possível obter a porosidade em cada ponto (58).

$$\varphi_i = \frac{S_i \cdot \varphi_{RMN}}{\sum S_i} \quad (58)$$

Além do modelo de permeabilidade SDR (41), esta dissertação utiliza a modelagem a partir dos dados de RMN elaborada por Han (2018), dada pela equação (59). Este modelo leva em conta frações da curva de distribuição de relaxação T_2 , figura 31. Enquanto o SDR utiliza apenas um valor de corte para o tempo T_{2lm} , Han utiliza frações que estão associadas aos tamanhos de poros, sendo as frações S_1 , S_2 , S_3 e S_4 tamanhos de poros correspondentes a microporos, mesoporos, macroporos e super-macroporos. Esses valores podem ser mais bem calibrados quando se realiza a análise de tamanho de poros a partir da técnica de Intrusão de Mercúrio por Pressão Capilar (MICP), porém os valores da literatura são bem semelhantes, sendo eles os cortes T_2 em 30, 90, 200 e acima de 200 milissegundos, respectivamente.

Figura 31 - Intervalos de proporções dos tamanhos de poros a partir de uma curva de distribuição T_2 .



Fonte: Han *et al* (2018, p. 186).

$$k_{Han} = a\varphi_{RMN}^b \frac{S_3^c \cdot S_4^d}{S_1^e \cdot S_2^f} \quad (59)$$

Han *et al* avalia que, assim como o método de Coates, onde há uma fração que contribui para a porosidade, FFI e a fração que não contribui BVI, aqui os micros e meso poros não contribuem para a permeabilidade enquanto as frações meso e

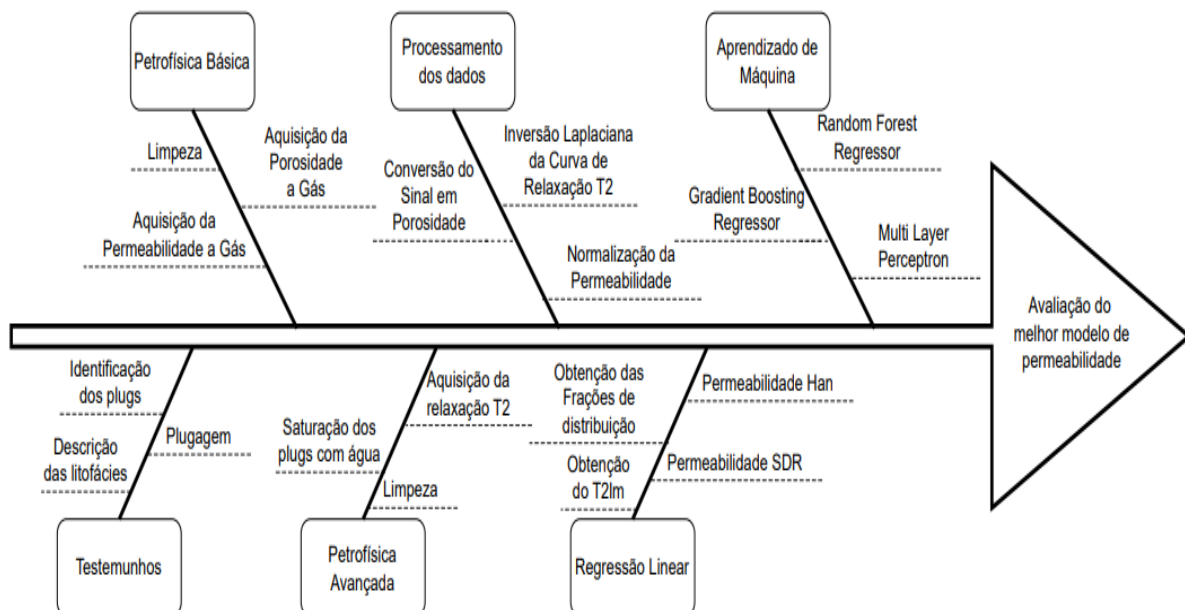
supermacro poros contribuem. Portanto, é uma melhora do modelo de Coates, uma vez que será possível obter mais parâmetros da curva da distribuição de relaxação T_2 .

3.3. Aprendizado de máquina

3.3.1. Treinamento Supervisionado

O treinamento dos modelos para previsão da permeabilidade foi realizado com a supervisão dos dados. Assim, todas as curvas de distribuição de tamanho de poros tinham o valor da permeabilidade como rótulo. Mas para alcançar essa etapa de treinamento foi necessário seguir um fluxo de trabalho que vai desde a aquisição dos testemunhos, descrição, plugagem, limpeza, aquisição de dados petrofísicos de rotina (porosidade e permeabilidade), secagem, saturação, preparação, aquisição dos dados petrofísicos avançados com RMN, processamento dos dados, além de outras etapas que concorrem com esse treinamento como as regressões lineares (Figura 32).

Figura 32 – Fluxo de trabalho para avaliação do melhor modelo de permeabilidade.



Fonte: Elaborada pelo autor.

3.3.2. Hiperparâmetros de Treinamento

Os hiperparâmetros desempenham um papel fundamental no processo de treinamento de modelos de aprendizado de máquina, pois são configurações ajustáveis que orientam o algoritmo durante a fase de treinamento, e com o qual são realizados os cálculos estatísticos que permitem à máquina “aprender” com padrões nos dados de treinamento. Portanto, a compreensão e manipulação hábil dos hiperparâmetros são elementos fundamentais na busca por modelos de aprendizado de máquina eficientes e bem-sucedidos.

Para que haja um aprendizado mais assertivo é necessário utilizar diversas combinações de hiperparâmetros. Esse procedimento foi realizado em pequenas etapas, uma vez que há um custo computacional relevante para realizar os treinamentos, e verificar cada uma das combinações escolhidas torna o trabalho custoso. Assim, foi utilizado a modelo de treinamento *GridSearchCV*, também disponibilizada pela biblioteca *Scikit-learn*. (Alhakeem *et al*, 2022).

O *GridSearchCV* simplifica o processo ao automatizar a busca por hiperparâmetros ideais. É o usuário que fornece uma lista de valores possíveis para cada hiperparâmetro de interesse, por exemplo, se duas quantidades diferentes de árvores de decisão e dois critérios distintos de avaliação forem selecionados, o *GridSearchCV* realizará todas as combinações possíveis (quatro no exemplo dado) e conduzirá os treinamentos correspondentes. O modelo avalia os resultados, identifica a combinação que proporciona o melhor desempenho e relata a configuração ótima. Logo, pode-se fazer uma varredura automatizada dos hiperparâmetros informados, treinar os modelos em sequência e no final será salvo apenas o modelo que apresentou melhor resposta, economizando recursos computacionais e de armazenamento.

Para a escolha dos hiperparâmetros foi realizada a divisão dos treinamentos dos modelos em diferentes etapas. Na primeira etapa foi selecionado a maior discrepância possível entre os hiperparâmetros, na etapa seguinte foi utilizado parâmetros mais finos com base na melhor resposta anterior, com o intuito de fazer convergir os resultados para um mínimo do modelo, e assim por diante até melhorar a estabilização do resultado.

3.3.2.1. Técnica Ensemble

Nesta dissertação foram empregados os modelos *Random Forest* (RF) e *Gradiente Boosting* (GB) da técnica *Ensemble*. Ambos os modelos foram implementados através da biblioteca *Scikit-learn*. Os hiperparâmetros utilizados pela técnica *Ensemble* são as quantidades de estimadores “*n_estimators*”, sendo um dos principais hiperparâmetros, pois determina a complexidade e a capacidade de generalização do modelo, o critério de acerto de cada decisão “*criterion*”, a profundidade máxima que cada árvore é criada “*max_depth*”, o número mínimo de amostras necessárias para realizar uma divisão de nó e o número mínimo de amostras em uma folha de nó “*min_samples_split*” e “*min_samples_leaf*”, respectivamente, e o “*bootstrap*”, que determina se a escolha de uma amostra para o treinamento pode ou não ser repetida ao longo do processo de treinamento, a taxa de aprendizagem do modelo “*learning_rate*” controla o tamanho do passo que é dado em cada otimização, a variância mínima para parar o treinamento “*tol*”, a função de perda “*loss*” que indica o quanto o modelo está errado orientando a sua otimização, e o “*alpha*” que avalia o erro no quantil desejado.

Os hiperparâmetros ajustados para o treinamento do modelo RF foram as “*n_estimators*”, “*criterion*”, “*max_depth*”, “*min_samples_split*”, “*min_samples_leaf*”, e o “*bootstrap*”. Desta maneira foram avaliadas 12180 combinações diferentes apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Random Forest.

Hiperparâmetros	Variações
n_estimators	512 até 7936
criterion	“Squared_error” ou “absolute_error”
max_depth	1 até 5
min_samples_split	2 até 16
min_samples_leaf	1 até 16
bootstrap	True ou False

Fonte: Elaborada pelo Autor.

Os hiperparâmetros ajustados para o treinamento do modelo GB foram as “*n_estimators*”, “*criterion*”, “*max_depth*”, “*min_samples_split*”, “*min_samples_leaf*”, “*learning_rate*”, “*tol*”, “*loss*” e “*alpha*”. Desta maneira foi avaliado 47880 combinações diferentes para este modelo apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Gradient Boosting.

Hiperparâmetros	Variações
n_estimators	512 até 10240
criterion	“Squared_error” ou “absolute_error”
max_depth	1 até 5
min_samples_split	2 até 32
min_samples_leaf	1 até 32
learning_rate	True ou False
tol	0.0001 ou 0.00001
loss	0.1, 0.05 e 0.01
alpha	0.9, 0.75 e 0.5

3.3.2.2. Modelo de Perceptrons em Múltiplas Camadas

O modelo de perceptrons em múltiplas camadas foram implementadas utilizando a biblioteca *Scikit-learn*. Os hiperparâmetros utilizados por este modelo são a função de ativação do perceptron “*activation*”, a taxa de regularização “*alpha*”, os valores que controlam a otimização dos perceptrons “*beta_1*” e “*beta_2*”, o valor de ϵ para evitar divisões por zero durante a otimização “*epsilon*”, a quantidade de perceptrons em cada camada e a quantidade de camadas “*hidden_layer_sizes*”, a forma da taxa de aprendizagem e seu valor “*learning_rate*” e “*learning_rate_init*”, a quantidade de retropropagações de otimizações realizada sem melhoria “*n_iter_no_change*” a função de otimização dos valores dos perceptrons “*solver*” e a tolerância para otimizações sem melhoria “*tol*”. Todos os hiperparâmetros foram variando até encontrar uma boa otimização, e a quantidade de retropropagações realizadas em todos os treinamentos foi de 4096.

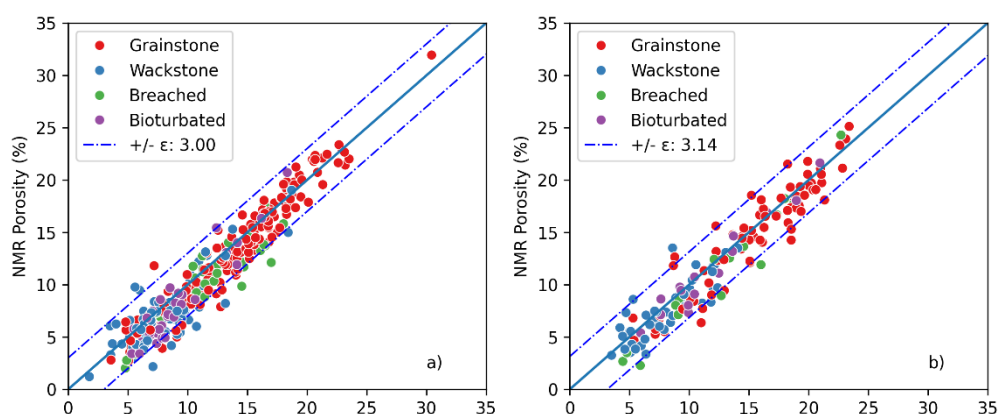
Tabela 3 - Apresentação das variações escolhidas para realizar os treinamentos do modelo Perceptrons em Múltiplas Camadas.

Hiperparâmetros	Variações
activation	“Tanh” ou “Relu”
alpha	0.001 ou 0.0001
beta_1	0.9 ou 0.8
beta_2	0.999 ou 0.9
epsilon	1e-08 ou 1e-09
hidden_layer_sizes	1, 2 ou 3 camadas ocultas, com 32 a 1024 neurônios em cada camada.
learning_rate: constant;	“Constante” ou “Adaptative”
learning_rate_init: 0.001;	0.01 ou 0.001
n_iter_no_change: 100;	100 ou 10
tol	1e-03 ou 1e-04 ou 1e-05

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados foram comparados entre a porosidade medida pelo método do gás e a porosidade obtida pela RMN, e o erro foi em torno de 3%, a mais ou a menos, em ambos os conjuntos de dados, conforme ilustrado na Figura 33. É notável que as litofácies exibem alta variabilidade na porosidade, variando entre 2% e 31%.

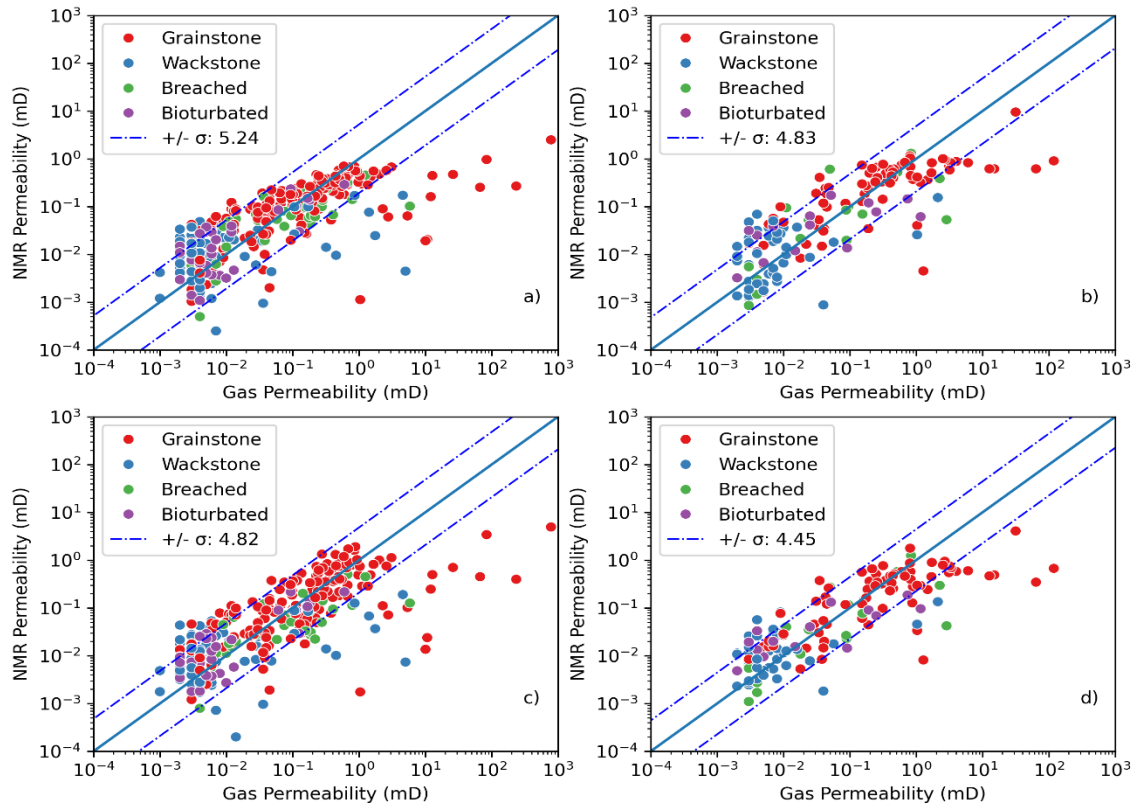
Figura 33 - Ajuste da porosidade medida por gás e por RMN com dados de a) Treinamento e b) Teste.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A comparação dos resultados entre a permeabilidade medida por gás e a previsão dos modelos empíricos e de aprendizado de máquina pode ser observada na Figura 34. Os resultados de permeabilidade utilizando os modelos empíricos a partir dos dados de ϕ_{RMN} mostraram uma previsão mais consistente no intervalo entre 10^{-2} mD e 1 mD, juntamente com um erro σ_k menor no conjunto de dados de teste, conforme ilustrado na Figura 34.

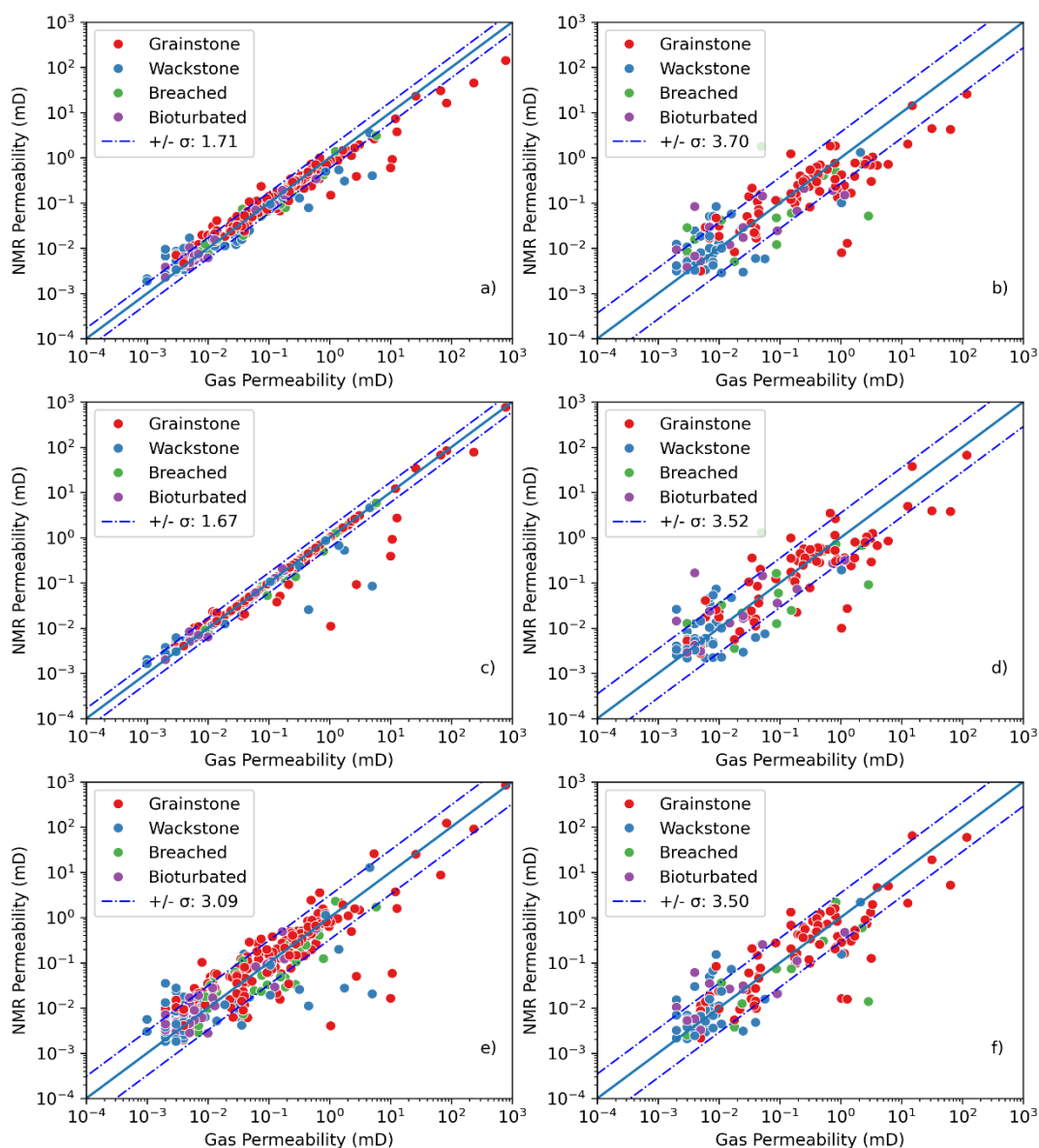
Figura 34 - Previsão de permeabilidade a partir dos modelos empíricos a) SDR treinamento, b) SDR teste, c) Han treinamento e d) Han teste.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Os resultados da previsão de permeabilidade dos modelos de aprendizado de máquina estão ilustrados na Figura 35. Pode-se observar que todos os modelos em todos os conjuntos de dados alcançam boa precisão, independentemente do intervalo de permeabilidade da amostra, prevendo tanto altas permeabilidades, acima de 10^2 mD, quanto baixas permeabilidades, abaixo de 10^{-2} mD.

Figura 35 - Previsão de permeabilidade a partir dos modelos de aprendizado de máquina: a) RFR Treinamento, b) RFR Teste, c) GBR Treinamento, d) GBR Teste, e) MLP Treinamento e f) MLP Teste.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Para obter esses resultados, são necessários recursos computacionais. A regressão linear pode ser realizada rapidamente por qualquer computador; no entanto, avaliar diversos modelos de aprendizado de máquina com as milhares de combinações de hiperparâmetros usadas para determinar o modelo ideal requer um tempo de treinamento considerável. O número de combinações de hiperparâmetros para cada modelo utilizado, as horas necessárias para treinar todas essas

combinações sequencialmente e a melhor combinação de parâmetros para cada modelo estão detalhados na Tabela 4.

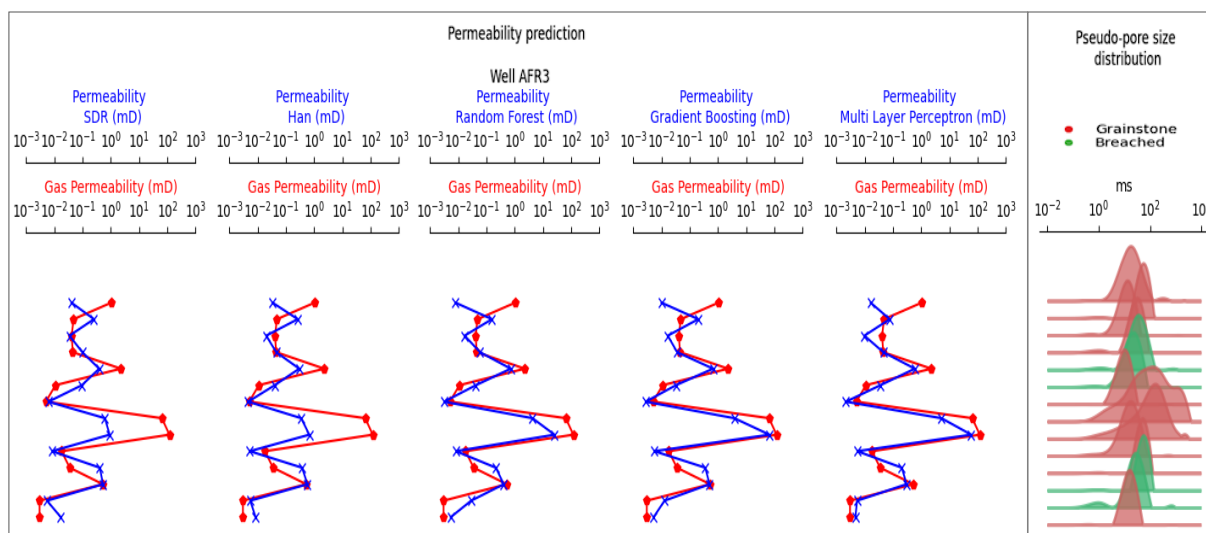
Tabela 4 - Número de combinações, tempo de treinamento e definição dos parâmetros ótimos para cada modelo.

MODELO	COMBINAÇÕES DE TREINAMENTO	HORAS DE TREINAMENTO	MELHORES HIPERPARÂMETROS
SDR	X	X	a: 7.2; b: 2.7; c: 0.41
HAN	X	X	a: 13.59; b: 2.43; c: 0.05; d: 0.07; e: 1.05; f: -0.02
RANDOM FOREST	12.180	108,93	bootstrap: True; criterion: squared_error; min_samples_leaf: 1; min_samples_split: 3; n_estimators: 742
GRADIENT BOOSTING	47.880	462,72	alpha: 0.9; criterion: friedman_mse; learning_rate: 0.1; loss: absolute_error; max_depth: 5; min_samples_leaf: 3; min_samples_split: 2; n_estimators: 1024; tol: 0.0001
MULTI LAYER PERCEPTRON	2.348	108, 13	activation: tanh; alpha: 0.01; beta_1: 0.9; beta_2: 0.9; epsilon: 1e-08; hidden_layer_sizes: (32, 64, 64); learning_rate: constant; learning_rate_init: 0.001; n_iter_no_change: 100; solver: adam; tol: 0.001

As representações dos perfis de permeabilidade de um poço em cada região estão ilustradas nas Figuras 36, 37 e 38. Os pontos mais altos no perfil indicam a permeabilidade dos plugs mais próximos à superfície; no entanto, o espaçamento entre eles não é necessariamente regular, pois apenas os dados de teste são exibidos. Cada plug contém a comparação entre os dados de permeabilidade por gás e cada modelagem separadamente, juntamente com a distribuição de relaxação T2.

Na Figura 36, correspondente à região AFR com o poço 03, os pontos oito e nove, localizados na porção central do poço, apresentam permeabilidades mal previstas pelos modelos empíricos devido à sua alta permeabilidade. No entanto, os modelos de aprendizado de máquina fazem inferências mais precisas, indicando claramente o aumento da permeabilidade nesta região (Figura 36).

Figura 36 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região do poço AFR 03.

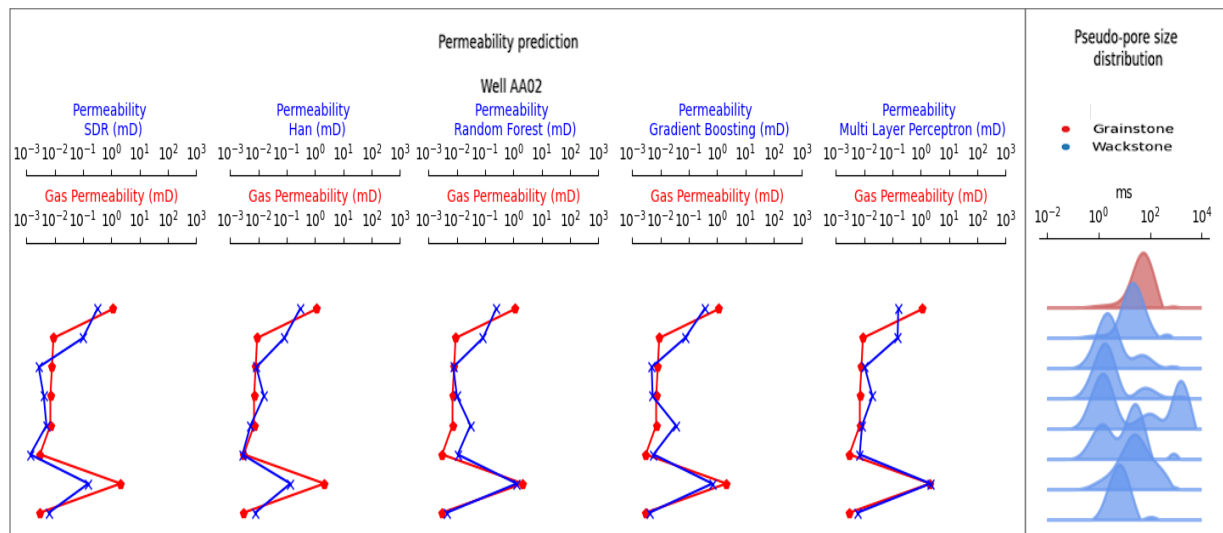


Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Figura 37, que cobre a região AA com o poço 02, os modelos empíricos não preveem com a mesma precisão que os modelos de aprendizado de máquina, especialmente no penúltimo ponto.

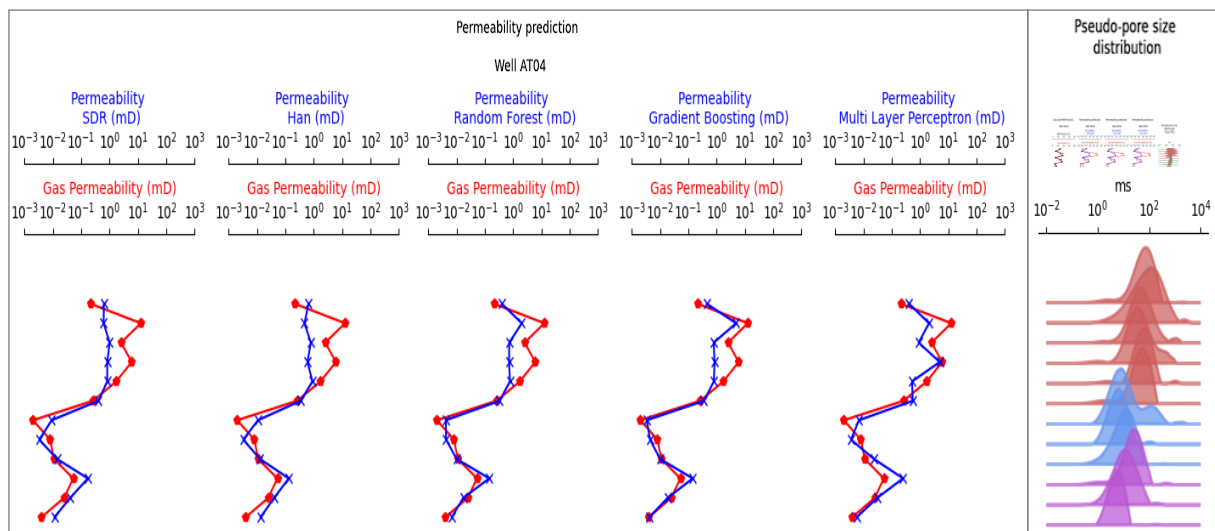
A Figura 38 mostra a região AT com o poço 04, onde a permeabilidade não é bem modelada pelas funções empíricas ajustadas, especialmente na região superficial, onde estão localizados os primeiros cinco pontos, enquanto os modelos de aprendizado de máquina alcançam resultados mais satisfatórios. Cada uma dessas regiões exibe suas próprias distribuições de litofácies, identificadas pelas cores da curva de distribuição de relaxação T_2 , refletindo variações nas estruturas de permoporosidade ao longo de cada poço

Figura 37 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região AA, poço 02.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 38 - Perfis de permeabilidade dos dados de teste a partir de suas respectivas curvas de distribuição de relaxação T_2 para cada amostra da região AT, poço 04.



Fonte: Elaborada pelo autor.

As aquisições de φ_{RMN} mostraram variação semelhante quando comparadas aos dados de φ_{Gas} em ambos os subconjuntos de dados, revelando, assim, a possibilidade de comparar esses conjuntos.

O uso do erro σ_k é baseado no método proposto por Kenyon *et al.* (1988) para avaliar o modelo SDR, resultando em um valor de 2,65 utilizando 60 amostras. Souza *et al.* (2013) também empregam esse erro para avaliação, embora com um ajuste SDR usando apenas três amostras de arenito e sete amostras de carbonato, obtendo um erro σ_k de 2,83. O trabalho de Chen *et al.* (2023) não relata explicitamente o erro σ_k ; no entanto, observa-se que ele está próximo de 3,10. Rezaee *et al.* (2021), que envolve aprendizado de máquina, não especifica o erro σ_k , mas eu estimo que, no conjunto de dados de treinamento, esse erro esteja muito próximo de 1,50, enquanto no conjunto de teste ele pode facilmente exceder 5,00. Zhu *et al.* (2017), que utilizam todos os dados das distribuições do tempo de relaxamento T2 para treinar um modelo de deep learning, estimam um erro σ_k próximo de 3,00, embora o conjunto de dados contenha apenas 200 amostras, com 116 para treinamento e um intervalo limitado de permeabilidade, variando de 10^{-2} mD a 10^1 mD.

Portanto, a ausência de informações em outros estudos que abordem esse tipo de erro, especialmente em amostras com alta heterogeneidade e em um amplo intervalo de permeabilidade, e a comparação direta entre modelos empíricos e de aprendizado de máquina, ressalta a importância de avaliar nossos resultados por meio de nossas próprias abordagens.

Na previsão de permeabilidade usando os modelos empíricos empregados neste estudo, os erros σ_k obtidos a partir dos dados de treinamento e teste foram, respectivamente, 5,24 (Figura 34-a) e 4,83 (Figura 34-b) para o modelo SDR, e 4,82 (Figura 34-c) e 4,45 (Figura. 34-d) para o modelo Han, um erro significativamente maior em comparação com estudos que modelam amostras com maior homogeneidade e em quantidades menores. A quantidade de amostras influencia o erro, sendo o menor erro precisamente no conjunto de dados de teste, por conter menos amostras. Isso é incomum para esse tipo de conjunto de dados, pois os dados ajustados para minimizar o erro normalmente pertencem ao conjunto de treinamento. Isso se deve à dificuldade dos modelos empíricos em ajustar permeabilidades acima de 10^2 mD e abaixo de 10^{-2} mD. Portanto, modelos lineares tendem a obter resultados próximos à média do conjunto de dados, concentrando os resultados dentro de um intervalo estreito de magnitude de permeabilidade para minimizar o erro.

A previsão de permeabilidade a partir dos modelos de aprendizado de máquina utilizados neste estudo resultou em erros σ_k para os dados de treinamento

e teste, respectivamente, de 1,71 (Figura 35-a) e 3,70 (Figura 35-b) para o modelo Random Forest, e 1,67 (Figura 35-c) e 3,52 (Figura 35-d) para o modelo Gradient Boosting. Esses modelos de ensemble demonstram uma excelente capacidade de capturar informações dos dados de RMN, pois alcançam erros σ_k menores em comparação com modelos que utilizam amostras homogêneas. Esses erros baixos podem indicar overfitting nos dados de treinamento. No entanto, em comparação com os modelos empíricos avaliados neste estudo, observa-se uma melhora notável nos resultados de teste, uma vez que esses modelos de ensemble conseguem prever toda a faixa de permeabilidades que variam de 10^{-3} mD a 10^3 mD com boa precisão.

O modelo MLP apresentou um erro σ_k de 3,09 (Figura 35-e) e 3,50 (Figura 35-f) nos conjuntos de dados de treinamento e teste, respectivamente. Embora seu erro σ_k seja ligeiramente maior em comparação com outras pesquisas que lidam com amostras mais homogêneas ou tamanhos de amostras menores, ele oferece uma vantagem significativa sobre os modelos empíricos abordados neste estudo. O modelo não mostrou sinais de overfitting nos dados de treinamento e ainda assim foi capaz de prever com precisão todo o espectro de permeabilidade em ambos os conjuntos de dados. Esse desempenho se traduz nos menores erros σ_k registrados no conjunto de dados de teste em comparação com todos os modelos avaliados nesta pesquisa.

Da mesma forma, há uma carência de estudos envolvendo análise geológica, permeabilidade e distribuições de tempo de relaxamento T_2 a partir de perfis de poços. Portanto, avaliaremos de forma concisa os aspectos mais relevantes em relação a essas dinâmicas. Algumas litofácies exibem padrões semelhantes nas distribuições de tempo de relaxação T_2 ao longo do perfil do poço analisado neste trabalho. Por exemplo, na região AFR (Figura 36), as litofácies Breached nos pontos 5, 6, 12 e 13, e todas as três litofácies na região AT (Figura 38), onde Grainstones são representados dos pontos 1 a 6, Wackstone dos pontos 7 a 9, e Bioturbated dos pontos 10 a 12.

O poço AT (Figura 38) revela variações significativas na permeabilidade entre cada litofácies. Por exemplo, há uma queda acentuada na permeabilidade entre os pontos 6 e 7, coincidindo com a transição entre duas litofácies, o que também se reflete nos padrões de distribuição do tempo de relaxação T_2 . O mesmo fenômeno é observado entre os pontos 9 e 10, onde ocorre uma mudança de litofácies,

acompanhada por uma alteração no padrão de distribuição, resultando em um aumento significativo na permeabilidade.

Os resultados de permeabilidade dos modelos empíricos revelam deficiências significativas em algumas seções dos poços, especialmente ao lidar com permeabilidades extremamente altas ou baixas, como evidenciado pelos pontos 8 e 9 na região AFR (Figura 36) e pelo ponto 7 na região AA (Figura 37). Em contraste, os modelos de aprendizado de máquina conseguem estimar valores muito mais próximos da permeabilidade medida por gás, sendo esse nível de precisão crucial para a interpretação e caracterização eficazes dos poços, fornecendo informações valiosas para a análise geológica e tomada de decisões em operações de exploração e produção.

5. CONCLUSÕES

Este trabalho teve como objetivo preencher a lacuna existente em trabalhos anteriores ao utilizar apenas dados de RMN para prever a permeabilidade em amostras com alta heterogeneidade, comparando modelagem empírica com modelos de aprendizado de máquina, utilizando um número razoável de amostras com alta variação de permeabilidade e empregando dois conjuntos de dados para a avaliação de todos os modelos.

Os resultados dos modelos empíricos mostraram-se consistentes com outros estudos, considerando a utilização de um conjunto de dados amplo e altamente heterogêneo.

Os modelos de aprendizado de máquina obtiveram resultados mais precisos em comparação aos modelos empíricos, alcançando um erro σ_k com uma precisão de até uma ordem de magnitude maior no conjunto de dados de teste em comparação aos modelos empíricos avaliados neste estudo. Essa melhoria destaca a capacidade preditiva dos modelos de aprendizado de máquina em comparação com os modelos empíricos tradicionais.

Entre os modelos de aprendizado de máquina, o modelo MLP destacou-se por seu potencial preditivo superior, evitando o overfitting dos dados de treinamento e alcançando o menor erro σ_k em comparação com os outros modelos utilizados neste estudo. Portanto, o treinamento de modelos de aprendizado de máquina com base na distribuição completa de relaxação T_2 permitiu previsões de permeabilidade em ambientes complexos, como reservatórios carbonáticos, com precisão significativamente maior do que os modelos analíticos convencionais.

Para aprimorar este trabalho, sugiro: (1) utilizar um conjunto de dados maior, (2) incorporar outros dados geofísicos de poços no treinamento dos modelos de aprendizado de máquina, (3) quantificar parâmetros geológicos para uso como dados de entrada no aprendizado de máquina, (4) empregar outros modelos de aprendizado de máquina, (5) criar uma base de dados para fins de ajuste fino, visando melhorar a generalização dos modelos.

REFERÊNCIAS

ALHAKEEM, Z. *et al.* Prediction of Ecofriendly Concrete Compressive Strength Using Gradient Boosting Regression Tree Combined with GridSearchCV Hyperparameter-Optimization Techniques. **Materials**, v. 15, n. 21, p. 7432. 2022.

AMAEFULE, J. *et al.* Enhanced Reservoir Description: Using Core and Log Data to Identify Hydraulic (Flow) Units and Predict Permeability in Uncored Intervals/Wells. **All Days**.1993.

ARAÚJO, R. *et al.* Pore network characteristics as a function of diagenesis: Implications for epigenic karstification in shallow-water carbonates. **Marine and petroleum geology**, v. 149, p. 106094–106094, 2023.

ARAÚJO, R. *et al.* Structural and sedimentary discontinuities control the generation of karst dissolution cavities in a carbonate sequence, Potiguar Basin, Brazil. **Marine and Petroleum Geology**, v. 123, p. 104753, 2021.

BAGNI, F. L. **O Carste Jandaíra, Bacia Potiguar, e suas implicações para a qualidade de reservatórios**. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Centro de Ciências Exatas e da Terra, Programa de Pós-Graduação em Geodinâmica e Geofísica—UFRN/PPGG. 2022

BAUD, P. *et al.* **The impact of cementation on permeability and strength of porous limestone**. Sociedade Brasileira de Geofísica. SIXTEENTH INTERNATIONAL CONGRESS OF THE BRAZILIAN GEOPHYSICAL SOCIETY. 2019.

BREIMAN, L. Random Forests. **Machine Learning**, v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001.

CARR, H. Y.; PURCELL, E. M. Effects of Diffusion on Free Precession in Nuclear Magnetic Resonance Experiments. **Physical Review**, v. 94, n. 3, p. 630–638, 1954.

CHEN, Z. *et al.* Characteristics and mechanisms of supercritical CO₂ flooding under different factors in low-permeability reservoirs. **Petroleum Science**, v. 19, n. 3, p. 1174–1184, 2022.

CIPOLLA, C. *et al.* Reducing Exploration and Appraisal Risk in Low Permeability Reservoirs Using Microseismic Fracture Mapping—Part 2. **All Days**, 2010.

COATES, G. R. *et al.* A New Characterization of Bulk-Volume Irreducible Using Magnetic Resonance. v. 39, n. 01, 1 jan. 1998.

- COATES, G. R. **NMR Logging Principles and Applications**. Gulf Professional Publishing, 1999.
- CUNNINGHAM, P. *et al.* Supervised Learning. **Machine Learning Techniques for Multimedia**, p. 21–49, 2008.
- DARCY, H. **Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon**. Paris: Victor Dalmont, 1859.
- DONG, X. *et al.* A survey on ensemble learning. **Frontiers of Computer Science**, v. 14, n. 2, p. 241–258, 2019.
- DUNHAM, R. J. **Classification of Carbonate Rocks According to Depositional Texture**. (W. E. Ham, Ed.) Classification of Carbonate Rocks. Tulsa: AAPG - Symposium, 1962.
- DUNN, K.-J. *et al.* **Nuclear Magnetic Resonance**. Elsevier, 2002.
- ERFANI, H. *et al.* Scaling CO₂ convection in confined aquifers: Effects of dispersion, permeability anisotropy and geochemistry. **Advances in water resources**, v. 164, p. 104191–104191, 2022.
- FRIEDMAN, J. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. **The Annals of Statistics**, v. 29, n. 5, p. 1189–1232, 2001.
- GÉRON, A. **Mãos à Obra Aprendizado de Máquina com Scikit-Learn e TensorFlow**. Alta Books, 2021.
- GRATON, L.; FRASER, H. Systematic Packing of Spheres: With Particular Relation to Porosity and Permeability. **The Journal of Geology**, v. 43, n. 8, p. 785–909, 1935.
- GREENE, D. *et al.* Unsupervised Learning and Clustering. **Machine Learning Techniques for Multimedia**, p. 51–90, 2008.
- GUERRIERO, V. *et al.* A permeability model for naturally fractured carbonate reservoirs. **Marine and Petroleum Geology**, v. 40, p. 115–134, 2013.
- HAHN, E. Spin Echoes. **Physical Review**, v. 80, n. 4, p. 580–594. 1950.
- HAMILTON, E. Variations of Density and Porosity with Depth in Deep-sea Sediments. **Journal of Sedimentary Research**, v. Vol. 46, n. 2, p. 280–300, 1976.
- HAN, Y. *et al.* A new permeability calculation method using nuclear magnetic resonance logging based on pore sizes: A case study of bioclastic limestone reservoirs in the A oilfield of the Mid-East. **Petroleum exploration and development**, v. 45, n. 1, p. 183–192. 2018.

HANSON, L. Is quantum mechanics necessary for understanding magnetic resonance? **Concepts in Magnetic Resonance Part A**, v. 32A, n. 5, p. 329–340, 2008.

HEBB, D. **The Organization of Behavior**. John Wiley & Sons, 1949.

HINTON, G. *et al.* A Fast Learning Algorithm for Deep Belief Nets. **Neural Computation**, v. 18, n. 7, p. 1527–1554, 2006.

KADKHODAIE, A.; KADKHODAIE, R. A Review of Reservoir Rock Typing Methods in Carbonate Reservoirs: Relation between Geological, Seismic, and Reservoir Rock Types. **Iranian Journal of Oil & Gas Science and Technology**, v. 7, n. 4, p. 13–35, 2018.

KANG, W. *et al.* Advances in enhanced oil recovery technologies for low permeability reservoirs. **Petroleum Science**, v. 19, n. 4, p. 1622–1640, 2022.

KENYON, W. *et al.* A Three-Part Study of NMR Longitudinal Relaxation Properties of Water-Saturated Sandstones. **SPE Formation Evaluation**, v. 3, n. 03, p. 622–636, 1 set. 1988.

KORRINGA, J. *et al.* Theory of Spin Pumping and Relaxation in Systems with a Low Concentration of Electron Spin Resonance Centers. **Physical Review**, v. 127, n. 4, p. 1143–1150, 1962.

LOPES, J. *et al.* Quantitative analysis of the tectonic subsidence in the Potiguar Basin (NE Brazil). **Journal of Geodynamics**, v. 117, p. 60–74, 2018.

LOPES, J. *et al.* Three-dimensional characterization of karstic dissolution zones, fracture networks, and lithostratigraphic interfaces using GPR cubes, core logs, and petrophysics: Implications for thief zones development in carbonate reservoirs. **Marine and petroleum geology**, v. 150, p. 106126–106126, 2023.

LU, T. *et al.* Enhanced Oil Recovery of Low-Permeability Cores by SiO₂ Nanofluid. **Energy & fuels**, v. 31, n. 5, p. 5612–5621, 2017.

MAFRA, M. **Dependência da porosidade e da permeabilidade com o tamanho e a forma de grãos em sedimentos não consolidados**. Monografia (Petrofísica)—Curso Geofísica – UFRN. 2022

MAHDAVIARA, M. *et al.* State-of-the-art modeling permeability of the heterogeneous carbonate oil reservoirs using robust computational approaches. **Fuel**, v. 268, p. 117389, 2020.

- MAYR, A. *et al.* The Evolution of Boosting Algorithms. **Methods of Information in Medicine**, v. 53, n. 06, p. 419–427, 2014.
- MCCULLOCH, W.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **The Bulletin of Mathematical Biophysics**, v. 5, n. 4, p. 115–133. 1943.
- MEIBOOM, S.; GILL, D. Modified Spin-Echo Method for Measuring Nuclear Relaxation Times. **Review of Scientific Instruments**, v. 29, n. 8, p. 688–691, 1958.
- PAN, Z.; CONNELL, L. D. Modelling permeability for coal reservoirs: A review of analytical models and testing data. **International Journal of Coal Geology**, v. 92, p. 1–44, 2012.
- PEDREGOSA, F. *et al.* Scikit-learn. **GetMobile: Mobile Computing and Communications**, v. 19, n. 1, p. 29–33, 2015.
- PEDREGOSA, F. *et al.* **3.1. Cross-validation: evaluating estimator performance.** Disponível em: https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html#stratified-shuffle-split. Acesso em: 9 ago. 2024.
- PFITZNER, J. Poiseuille and his law. **Anaesthesia**, v. 31, n. 2, p. 273–275, mar. 1976.
- ROSTAMI, A. *et al.* New insights into permeability determination by coupling Stoneley wave propagation and conventional petrophysical logs in carbonate oil reservoirs. **Scientific Reports**, v. 12, n. 1, p. 11618, 2022.
- RUMELHART, D.; ZIPSER, D. Feature Discovery by Competitive Learning. **Cognitive Science**, v. 9, n. 1, p. 75–112, 1985.
- RUSSELL, D.; PRATS, M. The Practical Aspects of Interlayer Crossflow. **Journal of petroleum technology**, v. 14, n. 06, p. 589–594, 1962.
- SAGI, O.; ROKACH, L. Ensemble learning: A survey. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery**, v. 8, n. 4, 2018.
- SAMUEL, A. L. Some Studies in Machine Learning Using the Game of Checkers. **IBM Journal of Research and Development**, v. 3, n. 3, p. 210–229, 1959.
- SCHÖN, J. **Physical properties of rocks: fundamentals and principles of petrophysics.** Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2015.
- SEGAL, M. **Machine Learning Benchmarks and Random Forest Regression.**
- SODRÉ, U. **Transformada de Fourier.** Curso de Ciências da Computação. 2002
- SODRÉ, U. **Transformada de Laplace.** Computação, Engenharia Elétrica e Engenharia Civil. 2003

SOUZA, A. **Estudo de propriedades petrofísicas de rochas sedimentares por Ressonância Magnética Nuclear**. Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ciência e Engenharia de Materiais. Área de concentração: Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais) —Escola de Engenharia de São Carlos / Instituto de Física de São Carlos / Instituto de Química de São Carlos. 2012.

SUN, X. *et al.* Modeling and optimization of vegetable oil biodiesel production with heterogeneous nano catalytic process: Multi-layer perceptron, decision regression tree, and K-Nearest Neighbor methods. **Environmental Technology & Innovation**, v. 27, p. 102794. 2022.

TIAB, D.; DONALDSON, E. **Petrophysics: theory and practice of measuring reservoir rock and fluid transport properties**. Amsterdam; Boston: Elsevier/Gpp, Gulf Professional Publishing Is an Imprint Of Elsevier, 2016.

TIKHONOV, A. On the solution of ill-posed problems and the method of regularization. **Doklady Akademii Nauk SSSR**, v. 151, n. 3, p. 501–504, 1963.

TIMUR, A. Pulsed Nuclear Magnetic Resonance Studies of Porosity, Movable Fluid, and Permeability of Sandstones. **Journal of Petroleum Technology**, v. 21, n. 06, p. 775–786, 1 jun. 1969.

TRAVASSOS, R. *et al.* Bacia Potiguar: Sumário Geológico e Setores em Oferta. **Superintendência de Avaliação Geológica e Econômica**, 2021.

Wikipedia Contributors. **Nuclear magnetic resonance**. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance. Acesso em: 9 ago. 2024.

WU, Y.; FENG, J. Development and Application of Artificial Neural Network. **Wireless Personal Communications**, v. 102, n. 2, p. 1645–1656, 2017.

ZHANG, Y. *et al.* Relative Permeability of CO₂ in a Low-permeability Rock: Implications for CO₂ Flow Behavior in Reservoirs with Tight Interlayers. **Energy Procedia**, v. 114, p. 4822–4831, 2017.

ZOU, C. *et al.* Genesis, classification, and evaluation method of diagenetic facies. **Petroleum Exploration and Development**, v. 35, n. 5, p. 526–540, 2008.

APÊNDICE A - APPLYING MACHINE LEARNING TO PREDICT PERMEABILITY IN CARBONATE ROCKS USING NMR T2 RELAXATION DATA

Esta dissertação resultou na elaboração do artigo intitulado como “Applying machine learning to predict permeability in carbonate rocks using NMR T2 relaxation data” submetido em 23 de maio de 2024 no jornal científico *Geophysics*, mas que ainda carece de revisão por pares.

Resumo

A permeabilidade é uma propriedade fundamental para a pesquisa e caracterização de reservatórios. Modelos empíricos de previsão de permeabilidade, que utilizam dados de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), tendem a não fornecer estimativas precisas em reservatórios complexos, como os reservatórios carbonáticos, além de preverem um intervalo restrito de valores. Modelos que utilizam métodos de aprendizado de máquina representam uma oportunidade para melhorar as previsões de permeabilidade e avançar na compreensão de reservatórios complexos. Para validar essa hipótese, foi realizado um estudo em um análogo de reservatório, caracterizado por alta carstificação, onde as rochas estudadas consistem em amostras de testemunhos de 14 poços perfurados na Formação Jandaíra, Bacia Potiguar, Brasil. As previsões de dois modelos analíticos, usados como exemplo, mostraram-se pouco confiáveis, tendendo a produzir resultados médios, uma vez que não se adaptaram bem a permeabilidades em um amplo intervalo de valores. Por outro lado, os modelos de aprendizado de máquina obtiveram resultados satisfatórios na previsão de permeabilidades no mesmo intervalo estudado. Portanto, quando se trata de utilizar dados de Ressonância Magnética Nuclear para a previsão de permeabilidade, os modelos de aprendizado de máquina oferecem uma clara vantagem em relação aos modelos analíticos convencionais ao lidar com ambientes geológicos complexos.

Abstract

Permeability is a fundamental property for research and characterization of reservoirs. Empirical permeability prediction models, which use Nuclear Magnetic

Resonance data, tend not to provide accurate estimates in complex reservoirs, such as carbonate reservoirs, in addition to predicting a narrow range of values. Models using machine learning methods represent an opportunity to improve permeability predictions and advance the understanding of complex reservoirs. To validate this hypothesis, a study was carried out in a reservoir analogue, characterized by high karstification, where the studied rocks consist of core plugs from 14 wells drilled in the Jandaíra Formation, Potiguar Basin, Brazil. The predictions of two analytical models, used as an example, turned out to be unreliable, tending to produce average results, as they did not adapt well to permeabilities over a wide range of values. On the other hand, machine learning models achieved satisfactory results in predicting permeabilities in the same range studied. Therefore, when it comes to using Nuclear Magnetic Resonance data for permeability prediction, machine learning models offer a clear advantage over conventional analytical models when dealing with complex geological environments.

APÊNDICE B - CARACTERIZAÇÃO DE UNIDADES DE FLUXO E DETERMINAÇÃO DE TIPOS DE POROS COM DADOS DE RMN E APRENDIZADO DE MÁQUINA

Esta dissertação resultou na elaboração do poster intitulado “Caracterização de Unidades de Fluxo e Determinação de Tipos de Poros com Dados de RMN e Aprendizado de Máquina” submetido no X Simpósio Brasileiro de Geofísica, que ocorrerá entre os dias 8 e 10 de outubro de 2024, em Salvador-Bahia.

Resumo

A avaliação das unidades de fluxo e a dos tipos de poros são aspectos fundamentais na caracterização de reservatórios e formações geológicas. Alguns métodos de avaliação das unidades de fluxo são obtidos através de porosidade e permeabilidade laboratoriais. É possível adquirir a porosidade diretamente através do método de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), e a partir desses dados obter a permeabilidade através de modelagens empíricas. Nesse contexto também é possível utilizar modelos de aprendizado de máquina para prever a permeabilidade a partir dos dados de RMN. Foram utilizados modelos empíricos e de aprendizado de máquina para a estimativa de permeabilidade. Comparou-se a caracterização de unidades de fluxo e a determinação de tipos de poros com os valores de porosidade e permeabilidade laboratoriais e com os resultados de porosidade e permeabilidades RMN. Comparado aos dados laboratoriais, os modelos empíricos não conseguiram caracterizar corretamente as diferentes litofácies quando se leva em conta os índices das zonas de fluxo (FZI), enquanto os modelos de aprendizado de máquina conseguem resultados mais satisfatórios. Além disso, ao caracterizar os tipos de poros utilizando a transformação polar, os modelos empíricos não conseguiram se aproximar dos resultados obtidos pelos dados laboratoriais, por outro lado os modelos de aprendizado de máquina se aproximaram com maior precisão. Portanto, a utilização de dados de RMN associadas a modelagens de aprendizado de máquina melhoram significativamente na caracterização de unidades de fluxo e na determinação de tipos de poros.