

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE GEOGRAFIA, GEOCIÊNCIAS E SAÚDE COLETIVA
CAMPUS MONTE CARMELO

IRAELLY GOMES LUIZ

ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DE
ROCHAS CARBONÁTICAS DO MARCO LULA, PRÉ-SAL DA BACIA DE SANTOS

Monte Carmelo - MG

2026

IRAELLY GOMES LUIZ

ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DE
ROCHAS CARBONÁTICAS DO MARCO LULA, PRÉ-SAL DA BACIA DE SANTOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Geologia do Instituto de Geografia,
Geociências e Saúde Coletiva da Universidade
Federal de Uberlândia, como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Geologia.

Orientadora: Profa. Dra. Josiane Branco Plantz
(IGESC – UFU)
Coorientador: MSc. Héllisson Nascimento dos Santos
(Lagesed – UFRJ)

Monte Carmelo - MG

2026

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

L953 Luiz, Iraelly Gomes, 2002-
2026 Análise Multivariada Aplicada à Caracterização Química de
Rochas Carbonáticas do Marco Lula, Pré-sal da Bacia de Santos
[recurso eletrônico] / Iraelly Gomes Luiz. - 2026.

1. Geologia. I. Plantz, Josiane Branco, 1992-, (Orient.). II. ,
Hélisson Nascimento dos Santos, 1991-, (Coorient.). III.
Universidade Federal de Uberlândia. Graduação em Geologia. IV.
Título.

CDU:

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE GEOGRAFIA, GEOCIÊNCIAS E SAÚDE COLETIVA
CAMPUS MONTE CARMELO

IRAELLY GOMES LUIZ

ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA À CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DE
ROCHAS CARBONÁTICAS DO MARCO LULA, PRÉ-SAL DA BACIA DE SANTOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Geologia do Instituto de Geografia,
Geociências e Saúde Coletiva da Universidade
Federal de Uberlândia, como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Geologia.

Monte Carmelo, 19 de março de 2026.

Banca Examinadora:

Profª. Dra. Josiane Branco Plantz (UFU)

MSc. Jeferson de Andrade Santos (Lagesed – UFRJ)

Dr. Maurícus Nascimento Menezes (CPGA – UFRJ)

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Projeto P, D&I PRESAL II (ANP 23009-4 – Impact of tectono-stratigraphic control on Pre-salt reservoir quality and distribution, Santos Basin) e ao Laboratório de Geologia Sedimentar (Lagesed – UFRJ) pela cessão dos dados utilizados neste estudo e pela bolsa de iniciação científica. Manifesto também minha gratidão a toda a equipe envolvida no projeto, com especial reconhecimento ao coordenador Prof. Leonardo Borghi, ao meu coorientador Héllisson Nascimento, que desde sempre acreditou no meu potencial, e aos pesquisadores Nathalie Díaz e Laís de Oliveira Ferreira, pelo apoio na obtenção dos dados e pela constante troca de conhecimentos.

Agradeço à Prof.^a Josiane Plantz, pelos conselhos, pela paciência, por ser inspiração constante e por me mostrar o quão fascinante é a Estratigrafia e o quão complexo e enriquecedor é estudar rochas finas, em especial as do pré-sal. Sua confiança e dedicação marcaram profundamente minha trajetória acadêmica.

Também agradeço aos professores da minha graduação, que foram fundamentais na minha formação, especialmente ao Prof. Marco Antônio Delinardo, pelas incríveis aulas de Geologia Estrutural, que mostraram a beleza das deformações das rochas. À Prof.^a Thaís Guitzlaf, por me mostrar o quanto cada depósito mineral carrega uma história única, bela e intrigante. Aos meus amigos, em especial Ana Vitória e Bruno, agradeço por tornarem essa caminhada mais leve.

À minha família, não há palavras suficientes para expressar o quanto vocês foram essenciais nessa trajetória. Vocês são meu alicerce. Minha mãe, com sua doçura e firmeza, me ensinou a permanecer de pé, a não desistir e a acreditar que eu era capaz. Meu pai, com suas ligações semanais, sempre me lembrando dos meus sonhos e me incentivando a continuar lutando por eles. Hoje estou voando, mas vocês sempre serão minha casa, meu porto seguro. À minha irmã Sara, à minha tia Irani e ao meu avô Dirceu (*in memoriam*) e ao meu companheiro Tercio, o meu mais profundo e eterno agradecimento por cada mensagem, cada ligação e cada gesto de carinho. Levo vocês comigo em cada conquista.

Por fim, agradeço à equipe de Planejamento de Curto Prazo de Tapira, especialmente à Paula, à Lidiane e ao Sérgio, por me apresentarem a Geologia na prática, com tanta paciência, generosidade e dedicação. Vocês ampliaram meu olhar profissional e contribuíram de forma significativa para minha formação.

Nenhuma sociedade que esquece a arte de
questionar pode esperar encontrar respostas
para os problemas que a afligem.

Zygmunt Bauman

RESUMO

Desde a descoberta das reservas do pré-sal da Bacia de Santos, avanços têm sido alcançados no entendimento dos reservatórios carbonáticos não marinhos, embora persistam discussões sobre processos deposicionais e distribuição espacial. Nesse contexto, destaca-se o Marco Lula, situado no topo da Formação Barra Velha, próximo à sucessão evaporítica da Formação Ariri. Esse intervalo é muito bem marcado por anomalias de raios gama total e espectral, especialmente urânio, e reúne evidências consistentes de atividade microbiana e exposição subaérea, contrastando com o modelo clássico de precipitação abiótica do pré-sal. Diante da relevância do Marco Lula, o presente estudo tem como objetivo identificar e descrever as texturas, estruturas sedimentares e assinaturas químicas diagnósticas do intervalo, além de comparar os resultados obtidos em poços perfurados nos Campos de Tupi e Iracema, pré-sal da Bacia de Santos. Para isso, propõe-se uma análise multitécnica e multiescala, envolvendo dados de testemunhos de sondagem, lâminas petrográficas e análises químicas de fluorescência de raios-X portátil (FRX-p) e MEV-EDS, obtidos a partir de três poços (A, B e C). Dados químicos quantitativos de FRX-p foram processados por meio de algoritmo de análise não supervisionada para definição de fácies químicas, enquanto os dados pontuais de MEV-EDS foram utilizados para refinar as fácies químicas e melhorar a compreensão acerca da distribuição dos compostos. Os resultados mostram que o Marco Lula é constituído essencialmente por rochas formadas *in situ*, calcilutitos (CLU), spherulestones (SPH) e shrubstones (SHB), e rochas retrabalhadas, calcarenitos (CRE) e calcirruditos (CRU), com destaque para a recorrência de CLU com laminações irregulares ou crenuladas. A proporção e o empilhamento dessas litologias variam significativamente entre os poços, com particularidades marcantes no poço C (Campo de Iracema), onde se discute um padrão tectônico distinto em relação ao Alto de Tupi. A análise multivariada de agrupamentos realizada neste estudo de caso permitiu reconhecer quatro fácies químicas (FQ1, FQ2, FQ3 e FQ4) comuns para os três poços, com ocorrência pontual de FQ5 no poço C. Essas fácies registram processos diagenéticos e deposicionais distintos, incluindo dolomitização, silicificação, aumento no aporte detrítico, deposição sob altas taxas de evaporação e influência de atividade hidrotermal. Apesar de não haver uma relação única entre litologia e fácies químicas, a relação estabelecida por análise de probabilidade indica a instalação de planícies microbiais associadas ao sistema lacustre raso do pré-sal, com indícios de incursões marinhas. Dessa forma, a análise integrada de dados e a abordagem adotada não só avança em questões metodológicas de processamento de dados, mas também permitiu uma melhor compreensão da evolução paleoambiental do Marco Lula, reforçando a importância da integração de dados petrográficos e químicos na caracterização de sistemas deposicionais complexos como o pré-sal da Bacia de Santos.

Palavras-chave: Rochas carbonáticas não marinhas; Calcilutitos com estruturas microbiais; Aprendizado de máquina não supervisionado; Fácies químicas.

ABSTRACT

Since the discovery of the pre-salt reserves in the Santos Basin, significant progress has been made in understanding non-marine carbonate reservoirs, although debates persist regarding depositional processes and spatial distribution. In this context, the Lula's Fingers stands out, located at the top of the Barra Velha Formation, near the evaporitic succession of the Ariri Formation. This interval is characterized by total and spectral gamma-ray anomalies, particularly uranium, and gathers consistent evidence of microbial activity and subaerial exposure, contrasting with the classical abiotic precipitation model. Given the relevance of the Lula's Fingers, this study aims to identify and describe the textures, sedimentary structures, and diagnostic chemical signatures of the interval, as well as to compare results from wells drilled in the Tupi and Iracema Fields. To achieve this, a multi-technical and multi-scale analysis was proposed, involving drill cores, petrographic thin sections, and chemical analyses via portable X-ray fluorescence (p-XRF) and SEM-EDS from three wells (A, B, and C). Quantitative p-XRF chemical data were processed using an unsupervised machine learning algorithm to define chemical facies, while SEM-EDS point data were used to refine these facies and improve the understanding of compound distribution. Results show that the Lula's Fingers is essentially composed of *in situ* rocks, calcilutites (CLU), spherulestones (SPH), and shrubstones (SHB), and reworked rocks, such as calcarenites (CRE) and calcirrudites (CRU), with a notable recurrence of CLU featuring irregular or crenulated laminations. The proportion and stacking patterns of these lithologies vary significantly between wells, with distinct features in Well C (Iracema Field) suggesting a different tectonic pattern compared to the Tupi High. Multivariate cluster analysis identified four common chemical facies (FQ1, FQ2, FQ3, and FQ4) across all three wells, with a localized occurrence of FQ5 in Well C. These facies record distinct diagenetic and depositional processes, including dolomitization, silicification, increased detrital input, high evaporation rates, and hydrothermal influence. Probability analysis indicates the establishment of microbial plains associated with the shallow lacustrine pre-salt system, with evidence of marine incursions. This integrated approach not only advances data processing methodologies but also provides a better understanding of the paleoenvironmental evolution of the Lula's Fingers, reinforcing the importance of integrating petrographic and chemical data in characterizing complex depositional systems such as the pre-salt of the Santos Basin.

Keywords: Non-marine carbonate rocks; Calcilutites with microbial structures; Unsupervised machine learning; Chemical facies.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Mapa de localização da Bacia de Santos. Note em (A) sua posição na margem leste brasileira, a seguir tem-se sua disposição entre os altos de Florianópolis e Cabo Frio, destacando o polígono do pré-sal e, em rosa claro, seus blocos exploratórios e campos produtores. Em rosa escuro, estão os Campos de Tupi e Iracema, região detalhada em (B), com a posição dos poços A, B e C, analisados neste estudo. As siglas RJ, SP, MG, PR e SC correspondem aos estados do Rio de Janeiro, São Paulo, Minas Gerais, Paraná e Santa Catarina, respectivamente. 18

Figura 2: Perfis de raio gama total (API) dos poços A, B e C utilizadas para delimitar o intervalo correspondente ao Marco Lula (retângulos vermelhos). Observe que nos poços A e B a amostragem é contínua e total por todo o intervalo de estudo (barra vertical em preto). No poço C, embora o topo estratigráfico do Marco Lula seja identificado em 4.900 m, a recuperação do testemunho iniciou-se apenas em 4.916 m (barra vertical em preto). 19

Figura 3: Fluxograma dos procedimentos metodológicos empregados neste estudo, desde a definição do intervalo Marco Lula, passando pelas caracterizações sedimentológica, petrográfica e geoquímica, incluindo as etapas de controle de qualidade, pré-processamento, análise multivariada, validação e integração dos dados. 20

Figura 4: Fluxo de trabalho para a realização da análise multivariada no *software* Orange Data Mining®. Os dados de entrada obtidos por FRX-p foram inicialmente submetidos ao pré-processamento para redução da dimensionalidade por meio do algoritmo *Self-Organizing Map* (SOM); enquanto na etapa de processamento e agrupamento utilizou-se o algoritmo *k-Means*. 25

Figura 5: Exemplo dos pontos de aquisição de dados por MEV-EDS no poço C. Os quadrados em amarelo indicam as regiões analisadas, escolhidas de modo a representar a heterogeneidade da amostra. A seleção considerou critérios petrográficos e texturais, como por exemplo: as laminações, possíveis concentrações de argilominerais e esferulitos bem preservados..... 28

Figura 6: Diagrama cronoestratigráfico simplificado do pré-sal na Bacia de Santos, destacando diferentes propostas de evolução tectono-estratigráfica do intervalo, conforme sugerido por: (1) Moreira *et al.* (2007); (2) Moulin *et al.* (2013), Torsvik *et al.* (2009) e Karner e Gambôa (2007) ; (3) Farias *et al.* (2019), Barnett *et al.* (2018) e Buckley *et al.* (2015); (4) Adriano *et al.* (2022); (5) Dehler *et al.* (2024). 30

Figura 7: Modelo esquemático de evolução das principais texturas observadas na Formação Barra Velha. O modelo reúne conceitos e elementos propostos em diversos estudos sobre os carbonatos da fase de subsidência do pré-sal do Atlântico Sul, destacando processos associados à redução da salinidade das águas lacustres. 33

Figura 8: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço A (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e das análises de MEV-EDS, além do percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas. 36

Figura 9: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço B (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e o percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas..... 37

Figura 10: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço C (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e das análises de MEV-EDS, além do percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas. 38

Figura 11: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço A. (A) CLU laminado gradando verticalmente para SPH laminado e (B) Contato entre SPH e SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B'). 40

Figura 12: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço B. (A) CLU laminado, (B) SPH e (C) SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A'), (B') e (C'). 40

Figura 13: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço C. (A) CLU laminado no topo e SPH na base, (B) SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B'). 41

Figura 14: Características composicionais observadas em lâminas petrográficas nos calcilutitos (CLU) do Marco Lula. (A, C e E) CLU intensamente substituído por dolomita mosaico e blocosa nos poços A, B e C, respectivamente; e (B, D e F) CLU com sílica micro e macrocristalina nos poços A, B e C. Em (B) a seta amarela indica a presença de calcedônia. 43

Figura 15: Estruturas sedimentares observadas em lâminas petrográficas nos calcilutitos (CLU) do Marco Lula. (A, C e E) CLU com laminações regulares nos poços A, B e C, respectivamente (setas amarelas); e (B, D e F) CLU com laminações irregulares nos poços A, B e C, respectivamente (setas brancas). 44

Figura 16: Características dos *spherulestones* (SPH) do Marco Lula em lâmina petrográfica. (A) SPH com esferulitos coalescidos (seta vermelha) em matriz argilosa e dolomita lamelar; (B) SPH com esferulitos coalescidos (seta vermelha), bordeadas por dolomita lamelar; (C) SPH em matriz argilosa, parcialmente substituída por dolomita lamelar; (D–E) SPH com esferulitos (seta vermelha) dispersos e intensa cimentação por dolomita em mosaico; (F) SPH intensamente dolomitizado, com desenvolvimento de dolomita romboédrica. As setas amarelas indicam dolomita lamelar. 46

Figura 17: Características petrográficas dos *spherulestones* (SPH) do Marco Lula, na presença de sílica (setas vermelhas). Note que em (A) a seta amarela indica a ocorrência de sílica microcristalina e em (B, D e E) tem-se, além da sílica microcristalina, sílica macrocristalina (menos abundante). Com destaque em (B) para a sílica substituindo esferulitos, em (E) para a relação do esferulitos com a matriz argilosa. Em (C) observa-se a presença de esferulitos de sílica e em (F) tem-se um nódulo de sílica microcristalina (seta amarela). 47

Figura 18: Características microscópicas dos *shrubstones* (SHB) do Marco Lula (setas vermelhas), com destaque para a morfologia dos *shrubs* nos poços A (A e B), B (C e D) e C (E e F). Em (A) tem-se agregados de fasciculares e quartzo macrocristalino preenchendo poros (seta amarela), em (B, C e E) *shrubs* em forma de leque substituídos por calcita (seta amarela), em (D e F) *shrubs* dendrifomes agregados calcíticos com cimentação dolomítica (seta amarela), com destaque em (E) para a dolomita romboédrica (seta amarela). 49

Figura 19: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço A. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços e intensamente dolomitizados. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B'). 50

Figura 20: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço B. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços, dolomitizados e pontualmente observa-se nódulos de sílica (seta amarela). As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B'). 51

Figura 21: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço C. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços, dolomitizados e pontualmente observa-se nódulos de sílica. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B'). 52

Figura 22: Características microscópicas dos calcarenitos (CRE) do Marco Lula com intraclastos de *spherulestone* (SPH), *shrubstone* (SHB) e indiferenciados indicados pelas setas amarelas. Note a ampla recorrência de clastos carbonáticos indiferenciados (setas vermelhas), em (A) tem-se cimento de dolomita preenchendo poros; (B) destaque para a ocorrência de clastos vulcânicos (seta amarela), (C) CRE com sílica preenchendo parcialmente os poros, (D) Dolomito, (E e F) CRE calcítico com intraclastos. 53

Figura 23: Características microscópicas dos calcirruditos (CRU) do Marco Lula. Note a ampla recorrência de clastos carbonáticos indiferenciados, com destaque em (A, B, C e D) para a presença de sílica macro- e microcristalina preenchendo poros, feições recorrentes nos poços A e B. Em (E e F) tem-se a presença de intraclastos de *spherulestone* (SPH) e *shrubstone* (SHB) como constituintes dos CRU indicados pelas setas amarela e vermelha, respectivamente.....54

Figura 24: Cadeias de Markov construídas com base nas principais litologias descritas para o Marco Lula nos poços A, B e C (A, B e C, respectivamente). O polígono cinza destaca a separação bem definida entre as rochas formadas *in situ* e as rochas retrabalhadas. As linhas tracejadas indicam as maiores probabilidades de transição vertical entre as litologias, enquanto a linha laranja marca a presença de rochas retrabalhadas sobre as rochas formadas *in situ*, indicando mudanças relevantes nas condições deposicionais. As abreviações correspondem a: CLU – calcilutito, SPH – *spherulestone*, SHB – *shrubstone*, CRE – calcarenito, CRU – calcirrudito, BRE – brecha e EVA – evaporito. 55

Figura 25: Mapas auto-organizáveis (*Self-Organizing Maps* – SOM) empregados na redução da dimensionalidade da base de dados para (A) dados sintetizados do Marco Lula no poço A; (B) poço B; e (C) poço C. Cada célula da malha hexagonal representa um neurônio do mapa, onde são associadas amostras com características composicionais semelhantes. O diâmetro dos círculos é proporcional ao número de análises que compartilham a mesma posição na malha, conforme indicado na legenda. 61

Figura 26: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço A. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço A (A1, A2, A3, A4 e A5) de acordo com as concentrações de (B) Fe, (C) Ba, (D) LE, (E) S e (F) Sr, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados. 64

Figura 27: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço B. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço B (B1, B2, B3 e B4) de acordo com as concentrações de (B) Fe, (C) K, (D) S, (E) Al e (F) LE, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados. 66

Figura 28: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço C. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço C (C1, C2, C3, C4 e C5) de acordo com as concentrações de (B) Ca, (C) Mg, (D) Si, (E) LE e (F) Sr, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados. 67

Figura 29: Mapas composicionais ilustrando a distribuição de Ca (A, D e G) e Mg (B, E e H) em diferentes exemplares associados a fácies química FQ1; e de Si (C, F e I) em exemplares de FQ2. Os mapas evidenciam a forma de ocorrência e a distribuição espacial desses elementos nas respectivas fácies químicas, de acordo com a textura de rocha. 71

Figura 30: Mapas composicionais com a distribuição espacial de Al (A, D e G), K (B, E e H) e Fe (C, F e I) na fácies química FQ3. As imagens evidenciam os padrões de concentração e a forma de ocorrência dos elementos diagnósticos em diferentes litotipos associados a essa fácies química. 72

Figura 31: Cadeias de Markov construídas com base nas fácies químicas identificadas para o Marco Lula nos poços A, B e C (A, B e C, respectivamente). O polígono cinza destaca a separação bem definida entre as fácies químicas FQ1, FQ3 e FQ4 e as linhas tracejadas indicam as maiores probabilidades de transição vertical entre as fácies químicas. 74

Figura 32: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3 e FQ4 em função das litologias descritas ao longo do poço A.....75

Figura 33: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3, e FQ4 em função das litologias descritas ao longo do poço B.....77

Figura 34: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3, FQ4 e FQ5 em função das litologias descritas ao longo do poço C. 78

Figura 35: Comparação dos padrões litológicos e químicos observados nos três poços analisados. Da esquerda para a direita: poços A, B e C, respectivamente. Os números (1, 2 e 3) correspondem aos padrões de empilhamento observados tanto para o poço A quanto para o poço B. Para o poço C esses padrões são identificados como I, II e III.....90

Figura 36: Estágio final da evolução tectono-estratigráfica da Formação Barra Velha proposto por da Silva *et al.* (2025). Observa-se as formações Camboriú, Piçarras, Itapema e Barra Velha, sendo a última representada por três intervalos (1, 2 e 3). A linha vermelha tracejada indica a discordância pré-Alagoas; a linha tracejada verde a discordância intra-Alagoas; e a linha tracejada rosa a base do Marco Lula. As setas vermelhas indicam os cenários identificados neste estudo de caso. 94

LISTA DE QUADROS

Quadro 1: Síntese das fácies químicas (FQ1–FQ5) identificadas no Marco Lula, com indicação dos respectivos elementos diagnósticos e acessórios, bem como sua correspondência com os *clusters* definidos para os poços A, B e C. Os elementos destacados em negrito correspondem aos identificados por quantificação nas análises de MEV-EDS..... 69

Quadro 2: Síntese das fácies químicas (FQ1–FQ5) identificadas no Marco Lula, com indicação dos respectivos elementos diagnósticos, bem como sua correspondência com as litologias dominantes para os poços A, B e C e seu significado geológico. 79

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço A.	57
Tabela 2: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço B.....	58
Tabela 3: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço C.....	58
Tabela 4: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço A.	59
Tabela 5: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço B.	59
Tabela 6: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço C.	60
Tabela 7: <i>Clusters</i> representativos do Marco Lula no poço A. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os <i>clusters</i> e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.....	62
Tabela 8: <i>Clusters</i> representativos do Marco Lula no poço B. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os <i>clusters</i> e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.....	62
Tabela 9: <i>Clusters</i> representativos do Marco Lula no poço C. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os <i>clusters</i> e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.....	62

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	15
2.	OBJETIVOS E FINALIDADE	16
3.	MATERIAIS E MÉTODOS	17
3.1	Materiais	17
3.2	Métodos	20
4.	CONTEXTO GEOLÓGICO	29
4.1	Formação Barra Velha.....	32
5.	RESULTADOS	35
5.1	Caracterização textural do Marco Lula	35
5.1.1	Rochas carbonáticas formadas <i>in situ</i>	35
5.1.2	Rochas carbonáticas retrabalhadas	48
5.1.3	Padrões litológicos do Marco Lula.....	54
5.2	Caracterização química do Marco Lula.....	57
5.2.1	Fácies químicas definidas por análise multivariada de agrupamento.....	57
5.2.2	MEV-EDS no detalhamento das fácies químicas.....	69
5.2.3	Padrões químicos do Marco Lula	73
5.3	Integração de dados litológicos e químicos para o Marco Lula	75
6.	DISCUSSÕES	80
6.1	Metodologia aplicada na definição de fácies químicas	80
6.2	Comparação entre os poços e implicações para os processos deposicionais e diagenéticos do Marco Lula.....	82
6.2.1	Padrão litológico e o modelo deposicional.....	82
6.2.2	Padrão composicional e suas implicações deposicionais e diagenéticas..	85
6.2.3	Padrões litológico e composicional e as anomalias de urânio.....	87
6.2.4	Heterogeneidades na distribuição vertical e lateral do Marco Lula	88
7.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	94
	REFERÊNCIAS	97

1. INTRODUÇÃO

O termo “pré-sal”, quando aplicado às bacias da margem leste brasileira, refere-se a um intervalo estratigráfico constituído por depósitos sedimentares e rochas ígneas, posicionado imediatamente abaixo de um espesso pacote evaporítico de idade aptiana (Moraes *et al.*, 2024). Esse intervalo abriga a maior reserva de petróleo provada em território brasileiro, com volume *in place* estimado em cerca de 100 bilhões de barris de óleo comercial (PPSA, 2024), tendo adquirido grande relevância científica e econômica após a declaração de comercialidade do Campo de Tupi, na Bacia de Santos, em 2010 (Moraes *et al.*, 2024).

O principal nível reservatório do pré-sal é constituído por rochas carbonáticas não marinhas que apresentam texturas, estruturas e padrões diagenéticos particulares, distinguindo-se tanto dos carbonatos marinhos quanto dos carbonatos continentais modernos. Sua gênese está associada à abertura do Atlântico Sul, em um contexto tectônico e deposicional singular, não existindo um análogo moderno capaz de reproduzir integralmente suas características. Essa ausência de analogia direta contribuiu para um intenso debate na literatura acerca da origem dessas rochas (*e.g.*, Wright, 2022; Basso *et al.*, 2020; Lima e De Ros, 2019; Farias *et al.*, 2019; Herlinger *et al.*, 2017, 2015; Muniz e Bosence, 2015; Wright e Barnett, 2014; Terra *et al.*, 2010; Moreira *et al.*, 2007).

O modelo deposicional atualmente mais aceito propõe que esses carbonatos resultam de precipitação abiótica em ambiente lacustre raso, alcalino e hipersalino, no qual oscilações do nível de base controlariam a formação de calcilutitos, *spherulestones* e *shrubstones*, compondo ciclos de rasamento e afogamento (Wright, 2022; Lima e De Ros, 2019; Basso *et al.*, 2020; Wright e Barnett, 2014, 2015). Estudos mais recentes, contudo, indicam a ocorrência de intervalos que registram condições ambientais menos estressantes, favorecendo o desenvolvimento de planícies rasas com maior influência de processos microbianos e evidências de exposição subaérea (*e.g.*, Ferreira *et al.*, 2025; da Silva *et al.*, 2025; Araújo *et al.*, 2024; Plantz *et al.*, 2024).

Nesse contexto, destaca-se o Marco Lula, um importante intervalo que marca a fase final de deposição do pré-sal na Bacia de Santos. Esse intervalo é caracterizado por anomalias marcantes nos perfis de raios gama total e urânio, expressas por sucessões de picos e cavas pronunciadas que se repetem entre cinco e nove vezes (Rebelo *et al.*, 2022; Wright e Rodriguez, 2018; Souto, 2010), servindo como referência para a correlação entre os poços.

As rochas que compõem o Marco Lula são frequentemente descritas de forma genérica como “microbiais” (da Silva *et al.*, 2025; Pietzsch *et al.*, 2018). Investigações mais detalhadas,

entretanto, demonstram que esse intervalo corresponde a uma sucessão heterogênea formada por rochas carbonáticas geradas *in situ* e por níveis retrabalhados (Plantz *et al.*, 2024; Rebelo *et al.*, 2022). Esses estudos ressaltam a relevância das litologias finas, especialmente os calcilutitos, por registrarem evidências de atividade microbiana e episódios de exposição subaérea em contraste com o modelo clássico de precipitação exclusivamente abiótica frequentemente atribuído aos carbonatos do pré-sal.

Essa heterogeneidade litológica reflete-se também na composição geoquímica das rochas. Dados disponíveis indicam uma associação recorrente dominada por Ca, Mg e Si, acompanhados de elementos como Al e Fe, que podem sinalizar contribuição detrítica. Teores elevados de Si e Mg, por sua vez, são frequentemente associados a níveis nos quais processos de silicificação e dolomitização modificaram significativamente a composição original da rocha (dos Santos *et al.*, 2025; Sanabria, 2022). Apesar dessas evidências, a maior parte das investigações não se dedica especificamente ao Marco Lula, de modo que suas características químicas permanecem ainda pouco caracterizadas, com escassa discussão integrada.

Diante dessas lacunas, busca-se ampliar a compreensão do Marco Lula por meio da integração de dados litológicos e geoquímicos. A estatística multivariada mostra-se particularmente adequada nesse contexto, pois permite reconhecer padrões composicionais complexos, identificar associações entre elementos químicos e evidenciar tendências que frequentemente não são perceptíveis em análises univariadas ou bivariadas tradicionais. Essa abordagem assume especial relevância nesse intervalo, no qual a recorrência de rochas carbonáticas finas e a intensa modificação pós-deposicional, que oblitera texturas, estruturas e a composição primária das rochas, dificultam a reconstrução de sua história deposicional.

2. OBJETIVOS E FINALIDADE

Com o propósito de refinar o conhecimento sobre o Marco Lula, este estudo tem como objetivo principal caracterizar e comparar as texturas, estruturas sedimentares e assinaturas químicas diagnósticas do Marco Lula em diferentes poços dos campos de Tupi e Iracema, no pré-sal da Bacia de Santos. A abordagem, baseada na integração de dados sedimentológicos e geoquímicos, tem como finalidade contribuir para o avanço das discussões sobre a influência microbiana nas rochas do Marco Lula, ampliando o entendimento sobre sua origem e condições paleoambientais ao longo do intervalo.

Para tanto, definem-se os seguintes objetivos específicos:

- (i) identificar as variações texturais e estruturas sedimentares do Marco Lula por meio da integração de descrições em escalas macro- e microscópicas;
- (ii) definir fácies químicas diagnósticas para o intervalo de estudo, a partir de dados de FRX-p processados por meio de um fluxo de análise multivariada de agrupamento;
- (iii) validar e refinar as assinaturas químicas obtidas por FRX-p por meio de mapas composicionais gerados por MEV-EDS; e
- (iv) investigar a influência de processos microbianos e de exposição subaérea na gênese das rochas finas do intervalo estudado.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Materiais

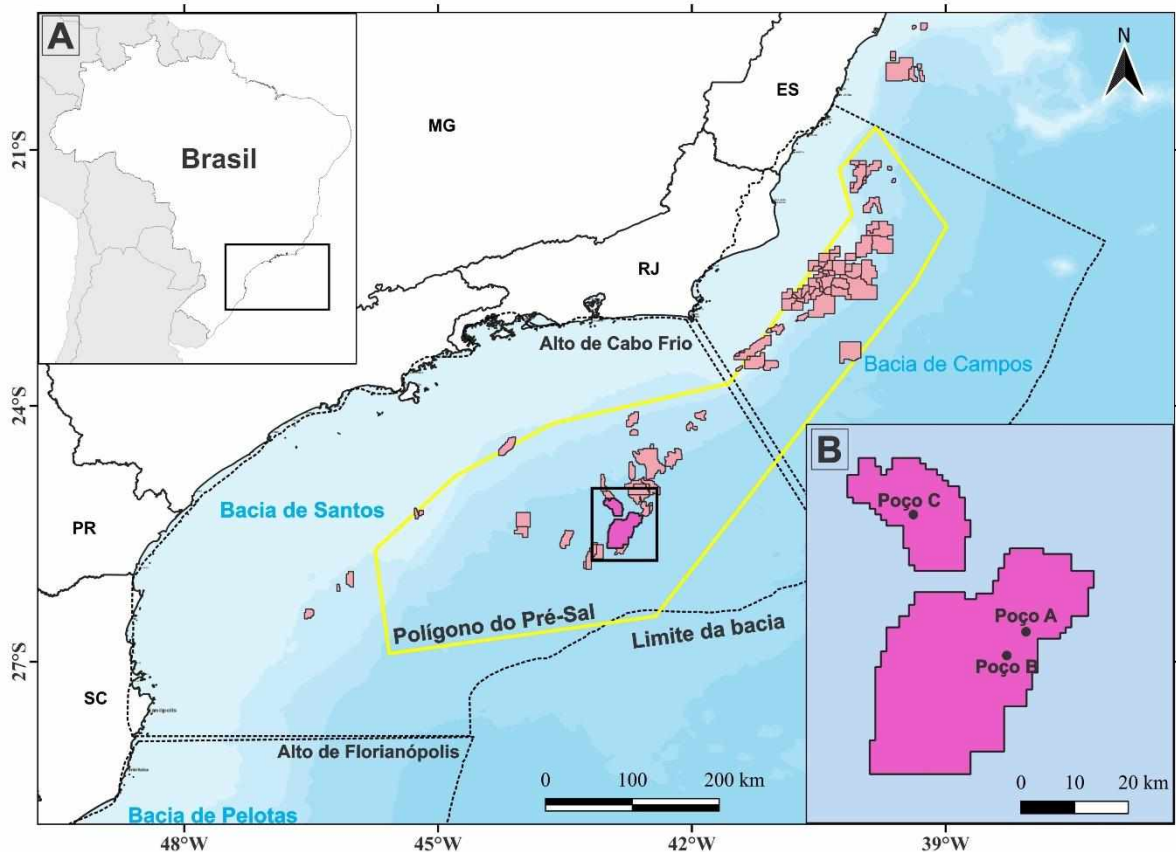
O conjunto de materiais analisados compreende dados do Marco Lula recuperado em três poços (A, B e C) perfurados no pré-sal da Bacia de Santos. Os poços A e B estão localizados no Campo de Tupi, enquanto o poço C situa-se no Campo de Iracema (Figura 1).

O reconhecimento petrofísico do intervalo do Marco Lula foi descrito por Rebelo *et al.* (2022), Wright e Rodriguez (2018) e Souto (2010), sendo facilmente identificado por meio de curvas de raios gama total e espectral, especialmente pelos sucessivos picos e cavas das curvas raios gama (API) e urânio (ppm – Figura 2). Para este estudo, foram utilizados dados de três poços que apresentam padrões que caracterizam o Marco Lula. No poço A, o Marco Lula apresenta aproximadamente 25 m de espessura, ocorrendo entre 5.032 e 5.057 m de profundidade, intervalo totalmente amostrado. No poço B, o intervalo de interesse atinge cerca de 30 m de espessura, entre 4.845 e 4.875 m, também integralmente recuperado de subsuperfície. Já no poço C, as curvas de raios gama indicam um intervalo total de 35 m de espessura, embora apenas 22 m tenham sido testemunhados, entre 4.916 e 4.938 m, conforme ilustra a Figura 2.

Os testemunhos dos poços A, B e C integram o acervo da Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) e foram temporariamente cedidos para análise ao Laboratório de Geologia Sedimentar (Lagesed – UFRJ), por meio dos Projetos P, D&I PRESAL (ANP 20.951-3) e PRESAL II (ANP 23.009-4). No âmbito desses projetos de pesquisa foi gerado e sistematizado um extenso conjunto de dados, que integra o acervo digital do Lagesed – UFRJ. Desse acervo, foram disponibilizados para o presente estudo de caso:

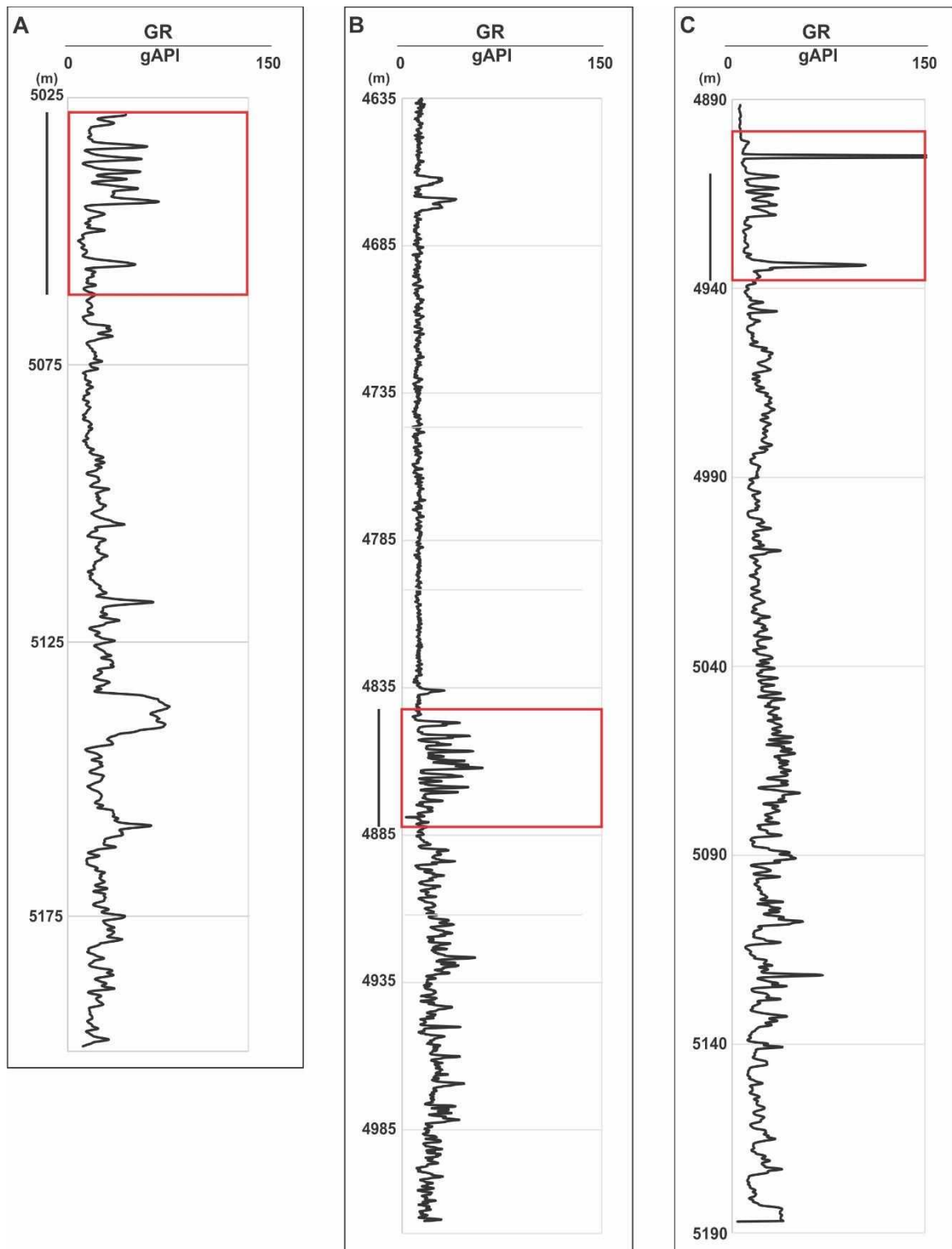
- (i) imagens de alta resolução e descrições detalhadas (escala 1:40) do intervalo correspondente ao Marco Lula dos poços A (25 m), B (30 m) e C (22 m), totalizando 77 m de testemunhos;
- (ii) digitalizações de alta resolução com polarização múltipla e descrições semiquantitativas de 296 lâminas petrográficas, sendo 126 confeccionadas ao longo do intervalo de estudo no poço A, 84 no poço B e 86 no poço C;
- (iii) dados químicos quantitativos obtidos a partir de um analisador portátil de fluorescência de raios X (FRX-p), em intervalos regulares de aproximadamente 30 cm, totalizando 85 análises pontuais ao longo do Marco Lula no poço A, 98 no poço B e 70 no poço C; e
- (iv) dados químicos quantitativos e mapas elementares obtidos por microscopia eletrônica de varredura com espectroscopia de energia dispersiva (MEV-EDS) em 30 lâminas petrográficas, 15 do poço A e 15 do poço C, representativas do Marco Lula.

Figura 1: Mapa de localização da Bacia de Santos. Note em (A) sua posição na margem leste brasileira, a seguir tem-se sua disposição entre os altos de Florianópolis e Cabo Frio, destacando o polígono do pré-sal e, em rosa claro, seus blocos exploratórios e campos produtores. Em rosa escuro, estão os Campos de Tupi e Iracema, região detalhada em (B), com a posição dos poços A, B e C, analisados neste estudo. As siglas RJ, SP, MG, PR e SC correspondem aos estados do Rio de Janeiro, São Paulo, Minas Gerais, Paraná e Santa Catarina, respectivamente.



Fonte: A autora (2026).

Figura 2: Perfis de raio gama total (API) dos poços A, B e C utilizadas para delimitar o intervalo correspondente ao Marco Lula (retângulos vermelhos). Observe que nos poços A e B a amostragem é contínua e total por todo o intervalo de estudo (barra vertical em preto). No poço C, embora o topo estratigráfico do Marco Lula seja identificado em 4.900 m, a recuperação do testemunho iniciou-se apenas em 4.916 m (barra vertical em preto).

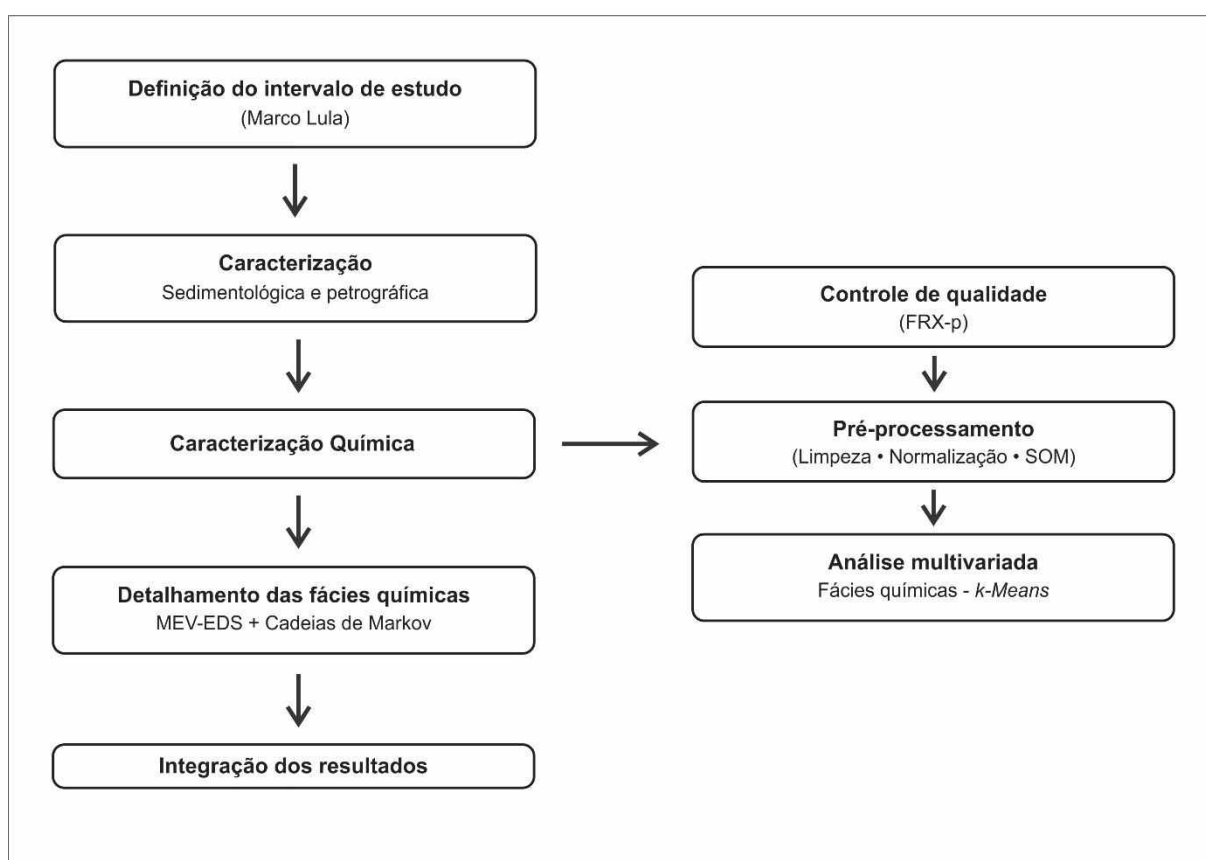


Fonte: A autora (2026).

3.2 Métodos

A metodologia adotada para a realização deste estudo foi organizada de forma sequencial, permitindo a integração entre dados sedimentológicos, petrográficos e geoquímicos para caracterização do intervalo do Marco Lula. A Figura 3 apresenta, de forma esquemática, o fluxo de trabalho desenvolvido, destacando as principais etapas.

Figura 3: Fluxograma dos procedimentos metodológicos empregados neste estudo, desde a definição do intervalo Marco Lula, passando pelas caracterizações sedimentológica, petrográfica e geoquímica, incluindo as etapas de controle de qualidade, pré-processamento, análise multivariada, validação e integração dos dados.



Fonte: A autora (2026).

Definido o intervalo correspondente ao Marco Lula nos poços A, B e C (Figura 2), foram utilizadas imagens de alta resolução em luz branca e ultravioleta (UV), obtidas a partir de um escaneador de testemunhos CoreScan (DMT), para realizar a comparação e reconhecimento das feições descritas por colaboradores dos Projetos P, D&I PRESAL e PRESAL II. Estas imagens são parte do acervo do Lagesed – UFRJ e permitiram a identificação das diferentes litologias, considerando aspectos como textura, composição, cor (segundo a escala de Munsell, 2012), tipos de contatos estratais e estruturas sedimentares. Embora baseadas em dados digitais,

adotou-se a metodologia de descrição sedimentológica proposta por Selley (1968), na escala de 1:40.

As rochas foram classificadas de acordo com as propostas de Borghi *et al.* (2022) e De Ros e Oliveira (2023) e, em seguida, suas relações verticais foram estabelecidas estatisticamente por meio de cadeias de Markov. Trata-se de um modelo matemático utilizado para descrever sistemas que evoluem em etapas sucessivas, nos quais a probabilidade de ocorrência de um determinado evento depende apenas do evento imediatamente anterior. Em termos sedimentológicos, esse princípio implica que a probabilidade de uma fácies sobrepor outra é condicionada apenas à fácies subjacente, e não às anteriores a ela (Xu e MacCarthy, 1998; Selley, 1970).

Essa abordagem permite simplificar o comportamento deposicional em uma estrutura probabilística, tornando possível quantificar e reconhecer padrões de transição verticais. A matriz de transição expressa a frequência que cada fácies sucede outra, e pode revelar tendências de empilhamento e ciclos deposicionais recorrentes.

O método proposto por Walker (1979), fundamentado em trabalhos anteriores de Selley (1970), Gingerich (1969) e Read (1969), e aplica a suposição markoviana para distinguir transições verticais estatisticamente significativas, interpretadas como o “sinal” dos processos deposicionais, de transições aleatórias, consideradas o “ruído” da sucessão. Dessa forma, é possível criar modelos dos ambientes deposicionais, minimizando a subjetividade comum às interpretações puramente qualitativas.

Neste estudo de caso as probabilidades de transição foram calculadas com o auxílio do *software* Strati Signal 1.0.5, que também gera as cadeias ilustrativas das relações genéticas entre as fácies, proporcionando maior precisão na caracterização e interpretação dos paleoambientes deposicionais.

Para detalhar a análise macroscópica, foram utilizadas digitalizações de lâminas petrográficas em alta resolução e sob polarização múltipla, obtidas no âmbito dos Projetos P, D&I PRESAL e PRESAL II. As imagens foram adquiridas por meio do escaneador de lâminas ZEISS Axioscan 7. Sua visualização e o processamento foram realizados no *software* ZEISS ZEN Blue (versão 3.9), que possibilitou a captura de fotomicrografias e a análise sistemática de aspectos texturais, estruturas sedimentares e composição. Foram avaliados tanto os constituintes primários quanto os produtos diagenéticos, com ênfase na forma de ocorrência de minerais como dolomita e quartzo, principais fases diagenéticas identificadas no intervalo do pré-sal estudado. A quantificação dessas fases diagenéticas foi realizada por meio de estimativas visuais em, no mínimo, cinco campos distintos de cada lâmina petrográfica.

Após o detalhamento litológico feito em escalas macro- e microscópicas, a caracterização química foi conduzida seguindo as quatro etapas (*a*, *b*, *c* e *d*) descritas a seguir. As etapas *a*, *b* e *c* foram realizadas individualmente, para cada um dos três poços analisados. Após isso, foi reconhecido um padrão químico válido para o intervalo de estudo e procedida a validação (etapa *d*).

(a) Controle de qualidade dos dados de fluorescência de raios X portátil (FRX-p).

As análises de FRX-p foram realizadas ao longo do intervalo de estudo dos poços A, B e C no âmbito dos Projetos P, D&I PRESAL e PRESAL II e os dados brutos foram disponibilizados em planilhas do Microsoft Excel®. A primeira etapa do controle de qualidade foi verificar, através dos registros operacionais, se a metodologia de aquisição dos dados foi a mesma para todos os poços.

Embora as aquisições tenham sido realizadas em momentos distintos e por diferentes operadores, o procedimento descrito a seguir foi mantido inalterado para o intervalo de estudo dos poços A e B. As medições pontuais foram realizadas em intervalos regulares de aproximadamente 30 cm, por meio de um analisador portátil de FRX da marca Olympus, modelo *Vanta M-Series* (VMR), pertencente ao Lagesed – UFRJ. O equipamento foi operado com dois feixes, em 50 kV e 10 kV com 0,2 mA e com tempo total de aquisição de 90 s, realizando leituras diretamente na superfície do testemunho, sem preparação prévia das amostras.

A principal diferença quanto à metodologia de aquisição aplicada ao poço C está no tempo de contagem, reduzido para 60 s, já que passaram a ser realizadas duas (2) aquisições em cada ponto amostral. Com isso, foi possível verificar a oscilação do equipamento e, na prática, passaram a ser utilizadas as médias obtidas entre as duas medidas realizadas, o que melhora a estatística de contagem e reduz o erro analítico.

Durante a aquisição de dados, a precisão analítica foi assegurada através da verificação diária do analisador de FRX-p. Para isso, utilizou-se o *calibration check* (cal check), que testa o sistema e garante que o mesmo opera sem quaisquer erros e/ou falhas em seus feixes e sistema de leitura. Adicionalmente, a cada 50 amostras eram realizadas medições em padrões de referência, incluindo *blank*, constituído 100% por SiO₂, e solo (NIST 2711A), ambos do *National Institute of Standards and Technology (NIST)*, dos Estados Unidos. Outro controle é o acompanhamento do erro percentual, que sob condições ideais de operação, é inferior a 1%.

Conhecidas as condições de operação do equipamento e de aquisição de dados, as planilhas foram verificadas a fim de detectar discrepâncias e possíveis erros gerados por

incompatibilidade entre o sistema do equipamento e o *software* utilizado para exportar os dados (e.g., supressão dos divisores decimais, fazendo com que a base de dados contenha valores extremamente elevados, ou, ainda, problemas na padronização dos marcadores decimais). Ainda para garantir a consistência dos dados, verificou-se se todas as informações exportadas do equipamento estavam expressas em elementos químicos e na mesma unidade de medida (e.g., percentual (%) ou partes por milhão (ppm)).

(b) Pré-processamento dos dados de FRX-p.

Garantida a qualidade dos dados, o pré-processamento consiste de três fases bem definidas: (i) limpeza e (ii) normalização, ambas realizadas no Microsoft Excel®; e (iii) redução da dimensionalidade da base de dados, feita no *software* Orange Data Mining (versão 3.40.0).

A limpeza do conjunto de dados envolve, essencialmente, a remoção de elementos que o equipamento não foi capaz de quantificar. O analisador de FRX-p é apto para identificar uma grande variedade elementar, contudo, seu limite de detecção (*limit of detection* – LOD) varia conforme o elemento químico, alcançando um máximo de 3.000 ppm (0,3%) para magnésio (Mg). Apesar de ser um limiar relativamente baixo, a planilha de dados é exportada com inúmeras indicações de <LOD, indicando que naquele ponto a concentração elementar é menor do que a capacidade do equipamento em quantificar. Com isso, faz-se necessário remover da base de dados a coluna correspondente aos elementos químicos com medidas <LOD, mantendo somente os elementos cujo padrão de ocorrência pode ser analisado ao longo de todo o intervalo estudado.

Na fase seguinte, são calculadas as medidas de tendências central (média, mediana, moda, desvio padrão e variância) dos elementos químicos mantidos na base de dados, tratados daqui em diante como “variáveis”. Constatado que as variáveis apresentam elevada variância, faz-se necessário normalizar os dados. Através da Equação 1, todas as variáveis (X) são comprimidas em um intervalo $[0, 1]$, tornando o processamento de dados mais consistente e confiável, já que impede que uma única variável seja dominante na definição de tendências e oculte padrões relevantes das demais variáveis.

$$X_{nom} = \frac{X - \bar{X}_{ín.}}{\bar{X}_{áx.} - \bar{X}_{ín.}} \quad (1)$$

Essa fase é especialmente importante para dados de FRX-p, visto que uma das principais inabilidades do equipamento é quantificar individualmente elementos com baixo número

atômico, como hidrogênio (H), lítio (Li), carbono (C) e sódio (Na), que são reportados em conjunto, como elementos leves (*light elements* – LE). Além disso, diversos autores (*e.g.*, Sterk *et al.*, 2018 e Parsons *et al.*, 2012) argumentam que o efeito matriz, bem como a presença de umidade nas amostras, pode causar um aumento irreal nas leituras de LE, que, de fato, são muito mais elevadas do que todas as demais.

A terceira e última fase do pré-processamento consiste na redução da dimensionalidade da base de dados. Para tal, optou-se por uma redução não linear da dimensionalidade por meio do algoritmo *Self-Organizing Map* (SOM), no qual amostras semelhantes são agrupadas e mapeadas, resultando em uma representação bidimensional que preserva as relações de similaridade entre as amostras e entre os dados de entrada (Kohonen, 2013; Liu *et al.*, 2006).

O SOM consiste em um modelo de auto-organização baseado em redes neurais (Licen *et al.*, 2023), aplicado à análise não supervisionada, no qual amostras com maior similaridade são associadas a nós mais próximos na grade, enquanto amostras menos semelhantes são posicionadas progressivamente mais distantes em uma representação bidimensional (Kohonen, 2013), permitindo a redução da dimensionalidade não linear dos dados.

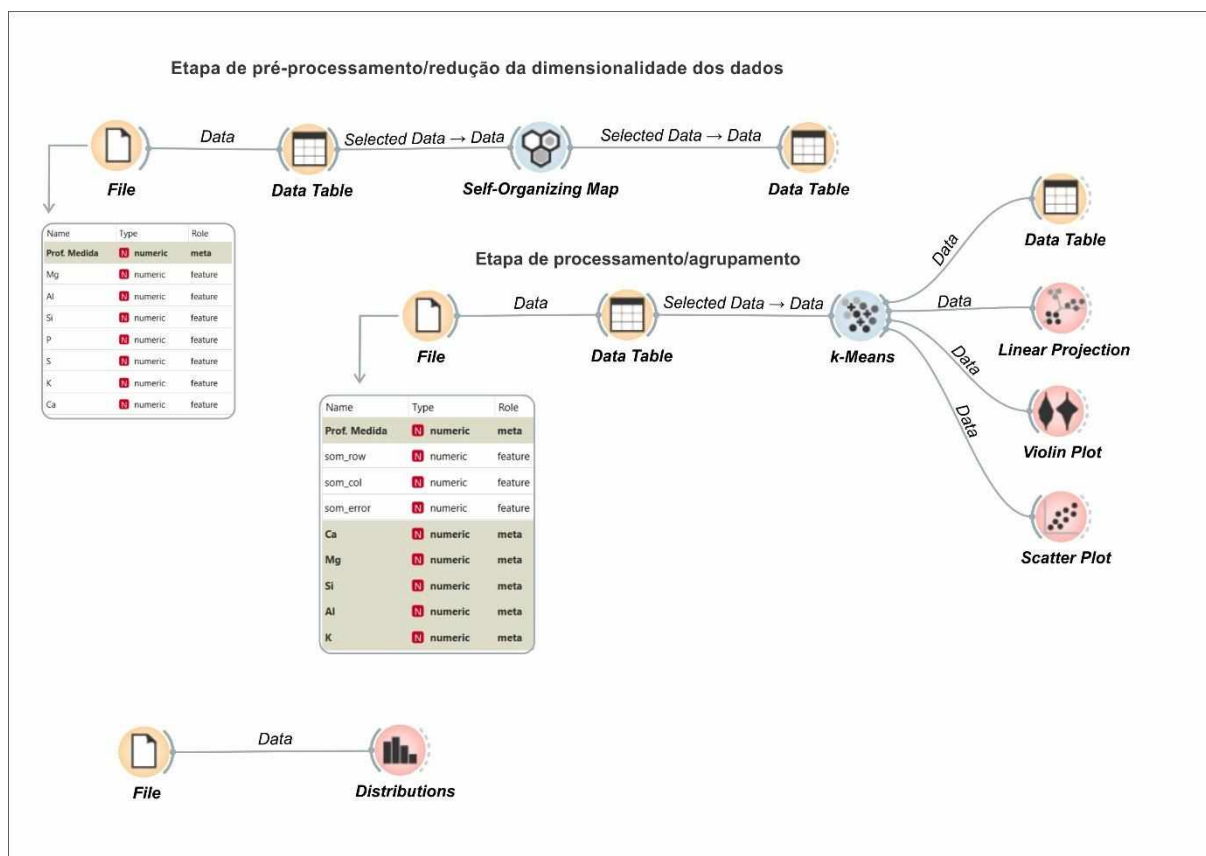
Admite-se, neste estudo de caso, que as medidas elementares refletem as variações intrínsecas à composição primária e/ou diagenética das rochas. Nesse sentido, não foi feita, durante o pré-processamento, a análise de *outliers* do banco de dados. Isto porque, segundo Knorr (2002), medidas que não estão de acordo com o comportamento geral ou modelo dos dados, apesar de inesperadas, podem ser legítimas e capazes de salientar as diferenças existentes entre os litotipos presentes em subsuperfície.

Nesta fase, com a base de dados limpa e normalizada, os dados foram importados no Orange Data Mining por meio do *widget* “*File*” (Figura 4), que realiza a leitura de arquivos .csv ou .xlsx e permite a integração de informações quantitativas (*e.g.*, FRX-p), qualitativas (*e.g.*, dados litológicos) e dados complementares, como profundidade de aquisição dos dados. Utilizando apenas as variáveis como “*features*” procedeu-se com a análise do SOM e, conforme indica a Figura 4, nesta fase, a visualização dos dados foi realizada apenas utilizando o “*Data Table*”.

(c) *Processamento dos dados de FRX-p.*

Para a realização da análise multivariada de variáveis quantitativas e contínuas foi utilizado o algoritmo *k-Means* (Figura 4), que agrupa dados baseando-se na distância euclidiana entre pontos. Sabe-se que em espaços de alta dimensão, esse método enfrenta problemas, por isso a necessidade da redução da dimensionalidade dos dados (fase de pré-processamento).

Figura 4: Fluxo de trabalho para a realização da análise multivariada no *software* Orange Data Mining®. Os dados de entrada obtidos por FRX-p foram inicialmente submetidos ao pré-processamento para redução da dimensionalidade por meio do algoritmo *Self-Organizing Map* (SOM); enquanto na etapa de processamento e agrupamento utilizou-se o algoritmo *k-Means*.



Fonte: A autora (2026).

Como o SOM transforma dados de alta dimensão em um mapa bidimensional (2D), tem-se como dados de saída da terceira fase do pré-processamento uma representação matricial, em que cada ponto de análise passa a ser referenciado pela posição que ocupa, indicando a célula, a coluna, a linha e o erro envolvido na análise do SOM. Para operacionalizar o uso do *k-Means*, apenas os indicadores de coluna e linha, que marcam a posição da análise na matriz do SOM, foram utilizados como “*features*”, reduzindo, deste modo, toda a complexidade química para apenas duas variáveis. Isto torna o algoritmo de agrupamento mais eficiente em sua análise.

A seleção do número de *clusters* do *k-Means* foi feita de modo manual, a partir do *silhouette score*, um coeficiente que avalia a distância média de separação entre os *clusters* resultantes (Shutaywi e Kachouie, 2021). Esse coeficiente varia entre +1 e -1, sendo que valores

mais próximos de +1 indicam uma maior coesão interna e separação entre grupos, o que é desejado; valores próximos de zero indicam dados próximos ao limite entre grupos vizinhos e valores negativos podem ser atribuídos a análises que foram erroneamente inseridas em um grupo.

Como o *k-Means* realiza o agrupamento com base nas características dos dados, permitindo reconhecer padrões, os agrupamentos resultantes representam grupos de rochas que possuem características químicas similares, ou seja, fácies químicas. A interpretação e visualização das fácies químicas são realizadas no próprio Orange Data Mining através de gráficos (e.g., *scatter plots*, *violin plots*, gráficos de projeção linear), que permitem relacionar os grupos definidos por *k-Means* com os elementos químicos utilizados como dados de entrada no SOM (Figura 4).

(d) *Validação e refinamento das fácies químicas utilizando microscopia eletrônica de varredura com espectroscopia por dispersão de elétrons acoplada (MEV-EDS).*

As fácies químicas permitiram reconhecer um padrão químico para o intervalo de estudo, contudo, as incertezas na quantificação feita através de um analisador de FRX-p trazem insegurança quanto a assertividades das interpretações (q.v., Kodikara *et al.*, 2024; Parsons *et al.*, 2012; Sterk *et al.*, 2018; Weltje e Tjallingii, 2008).

Nesse contexto, utilizou-se a aplicação de cadeias de Markov como uma abordagem complementar, buscando avaliar o empilhamento vertical das fácies químicas a partir de suas probabilidades de transição. Assim, a recorrência sistemática de determinadas fácies químicas permite reconhecer sucessões verticais, indicando que não se trata de uma informação randômica, o que valida o padrão químico reconhecido, mesmo diante das limitações do FRX-p.

Além disso e da aplicação de análise multivariada de dados, que, de acordo com Plantz e Borghi (2023), permite extrair dados semiquantitativos de boa qualidade a partir de dados quantitativos de baixa precisão, sendo útil em minimizar as incertezas na medição do FRX-p, a interpretação das fácies químicas foi validada e/ou refinada através de comparação com análises de MEV-EDS, que permitiram, também, analisar visualmente a distribuição dos compostos químicos.

Nesta etapa, a validação das fácies químicas foi realizada por meio da comparação entre os *clusters* e os mapas composicionais obtidos por MEV-EDS. Essa comparação baseou-se na verificação da correspondência entre os elementos diagnósticos de cada fácies e sua distribuição espacial na amostra analisada. Além disso, os mapas composicionais foram utilizados para avaliar a forma de ocorrência dos elementos e as associações entre eles, permitindo identificar

possíveis correspondências mineralógicas e reconhecer sua distribuição nas diferentes fácies químicas.

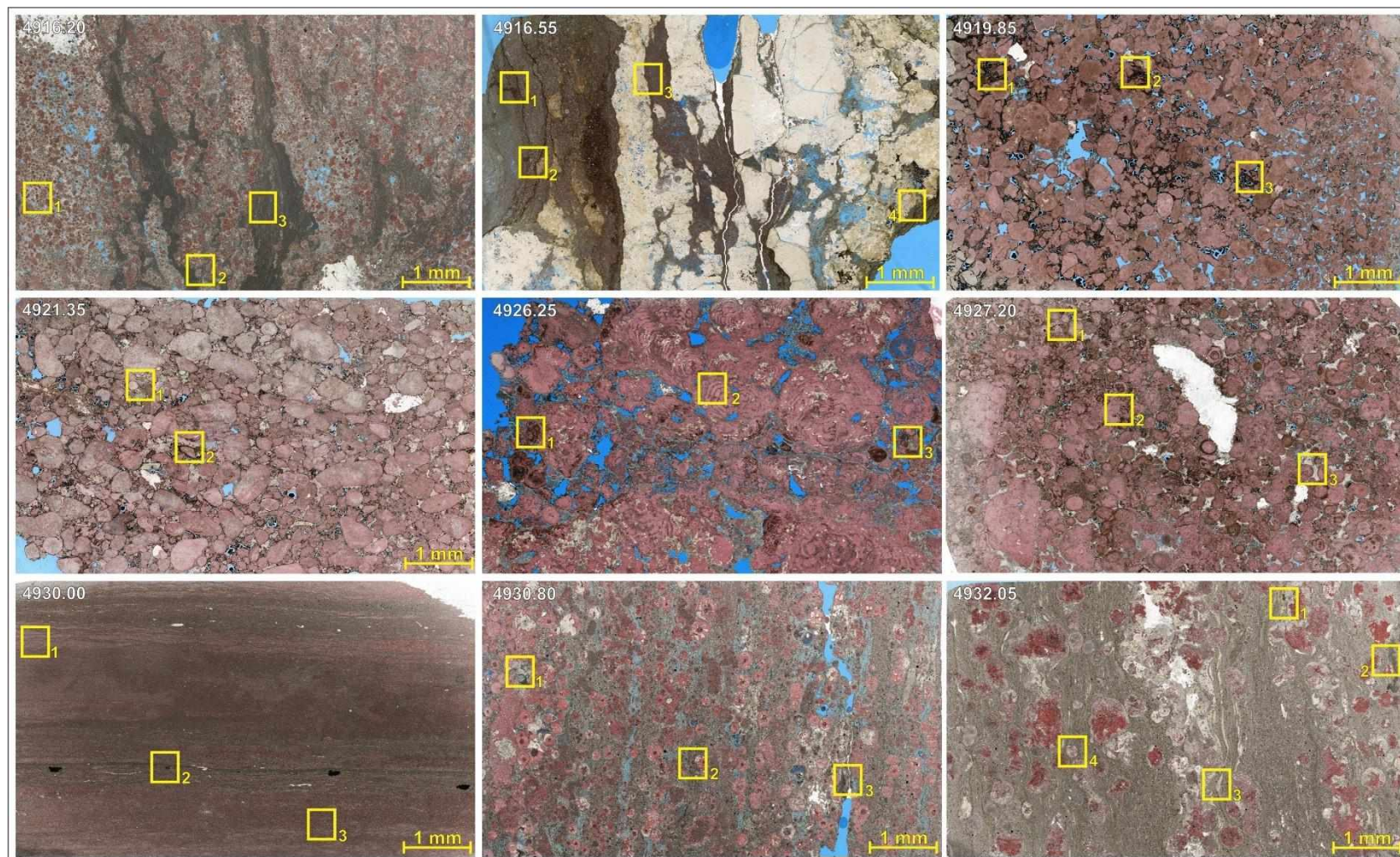
Dados de MEV-EDS foram obtidos diretamente em lâmina petrográficas e estão disponíveis apenas para os poços A e C. Considerando a natureza pontual da análise, cada lâmina foi subdividida em regiões específicas de interesse, variando entre dois e quatro pontos de aquisição, conforme ilustra a Figura 5.

As análises de MEV-EDS foram conduzidas por colaboradores do Projeto P, D&I PRESAL II, no Lagesed – UFRJ. Para essas análises, as lâminas selecionadas foram previamente polidas e recobertas com carbono, a fim de garantir a condutividade da superfície analisada durante a aquisição. Foi utilizado um microscópio eletrônico de varredura (MEV) HITACHI TM4000 Plus II, equipado com um sistema de microanálise química por dispersão de energia (EDS) X Flash 660H que possui janelas ativas de 60 mm². Esse sistema permite contagens da ordem de 150 kcps, com tempo morto entre 8% e 10%, e resolução espectral superior a 137 eV para o pico Mn K α .

Para este estudo de caso, o MEV foi operado em alto vácuo, aproximadamente 6 Pa, com tensão de aceleração de 20 kV e spot size de 4. As composições químicas quantitativas dos minerais foram medidas por EDS, utilizando o sistema Bruker Quantax já descrito, no modo quantitativo sem o uso de padrões com auto-calibração a partir da radiação de fundo (*Bremsstrahlung*) da análise, e correção ZAF por parâmetros fundamentais. O processamento dos dados foi realizado por meio do *software* utilizado Esprit versão 2.6 (Bruker AXS). A resolução da microanálise por EDS é da ordem de 1 micrômetro de raio na superfície analisada, com profundidade de interação variando aproximadamente entre de 1,5 a 5 micrômetro, dependendo da densidade do material, no ponto analisado.

Finalizada a aquisição de dados químicos por MEV-EDS, mapas composicionais foram gerados e utilizados para analisar a distribuição dos compostos químicos nas regiões selecionadas, buscando compreender as relações entre variações texturais, estruturas sedimentares e composição química, com foco na distribuição e forma de ocorrência dos compostos. Adicionalmente, o *software* CorelDRAW® Graphics Suite (versão XVIII) foi utilizado para integrar as informações litológicas e químicas em perfis verticais, facilitando a interpretação, comparação e correlação dos dados.

Figura 5: Exemplo dos pontos de aquisição de dados por MEV-EDS no poço C. Os quadrados em amarelo indicam as regiões analisadas, escolhidas de modo a representar a heterogeneidade da amostra. A seleção considerou critérios petrográficos e texturais, como por exemplo: as laminações, possíveis concentrações de argilominerais e esferulitos bem preservados.



Fonte: A autora (2026).

4. CONTEXTO GEOLÓGICO

A Bacia de Santos, localizada na margem sudeste do Brasil, cobre uma área de aproximadamente 350.000 km², abrangendo a costa dos estados do Rio de Janeiro, São Paulo, Paraná e Santa Catarina. Seu limite ao norte, com a Bacia de Campos, é definido pelo Alto de Cabo Frio, enquanto ao sul, o Alto de Florianópolis a separa da Bacia de Pelotas (Figura 1). Trata-se de uma bacia de margem divergente, formada no Eocretáceo, no contexto de ruptura do Supercontinente Gondwana e abertura do Oceano Atlântico Sul (Caldas e Zalán, 2009).

Considerando o cenário geotectônico, a Bacia de Santos é normalmente dividida em três grandes fases evolutivas (rifte, pós-rifte e drifte – Caldas e Zalán, 2009; Moreira *et al.*, 2007; Dias, 2005; Pereira e Feijó, 1994), contudo, são inúmeras as discussões quanto aos seus limites, posicionamento e idades. Conforme argumentam Zalán *et al.* (2011) e Peron-Pinvidic *et al.* (2013), grande parte dessa discussão se deve ao fato do rifte constituir um processo progressivo e diacrônico, de modo que alguns segmentos já ingressam no estágio pós-rifte enquanto outros permanecem na fase rifte.

De acordo com Moreira *et al.* (2007), a fase rifte foi responsável pela criação de espaço de acomodação para deposição das espessas sequências continentais da formação Piçarras e Itapema. Para os autores, esse período de tectonismo ativo se estendeu do Hauteriviano ao início do Aptiano (Figura 6), com clímax tectônico no Barremiano. Já a fase pós-rifte, correspondente ao andar Alagoas, caracterizou-se por um período de estabilidade tectônica e pelo desenvolvimento da discordância pré-Alagoas no topo da Formação Itapema.

Em contraste, Moulin *et al.* (2013), Torsvik *et al.* (2009) e Karner e Gambôa (2007) propõem que toda a Formação Barra Velha e, também os evaporitos da Formação Ariri foram depositados na fase rifte. Segundo essas propostas, as rochas do pré-sal da Bacia de Santos são resultado da sedimentação em sistemas lacustres interconectados, sujeitos a períodos de isolamento durante retração lacustre (Pietzsch *et al.*, 2018; Carminatti *et al.*, 2008). Todo esse cenário foi fortemente influenciado e moldado (em termos geométricos e químicos) pela fase de ruptura, que teria se estendido do Hauteriviano ao Aptiano (Figura 6).

Por outro lado, Farias *et al.* (2019), Barnett *et al.* (2018) e Buckley *et al.* (2015) defendem um modelo com dois estágios evolutivos para a Bacia de Santos, sendo o estágio de rifte, responsável pela deposição de sedimentos clásticos, e o pós-rifte marcada pelo desenvolvimento de uma extensa plataforma carbonática não marinha e pela deposição dos evaporitos da Formação Ariri, compostos principalmente por halita, carnalita e taquihidrita, no final do Aptiano (Figura 6).

Figura 6: Diagrama cronoestratigráfico simplificado do pré-sal na Bacia de Santos, destacando diferentes propostas de evolução tectono-estratigráfica do intervalo, conforme sugerido por: (1) Moreira *et al.* (2007); (2) Moulin *et al.* (2013), Torsvik *et al.* (2009) e Karner e Gambôa (2007); (3) Farias *et al.* (2019), Barnett *et al.* (2018) e Buckley *et al.* (2015); (4) Adriano *et al.* (2022); (5) Dehler *et al.* (2024).

Ma	Período	Idade	Estágio local brasileiro	Grupo	Formação	Marcos estratigráficos	Evolução da Bacia				
							(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
115	EOCRETÁCEO	Aptiano	Alagoas	GUARATIBA	Ariri	Base do sal	Pós-rifte	Rifte	Pós-rifte	Rifte posterior	
					Barra Velha Superior	Marco Lula					
120		Barremiano	Jiquiá		Barra Velha	Discordância Intra-Alagoas	Rifte		Rifte superior	Rifte II	
					Barra Velha Inferior	Discordância Pré-Alagoas					
125					Itapema	Discordância Pré-Jiquiá					
130		Hauteriviano	Aratu		Piçarras	Topo do basalto	Rifte	Rifte inferior	Rifte I		
135	Camboriú										
			Rio da Serra								

Fonte: Adaptado de Moreira *et al.* (2007), após Adriano *et al.*, (2022).

O estudo de Adriano *et al.* (2022) traz um refinamento para o modelo apresentado acima. Os referidos autores ratificam que a deposição do pré-sal, incluindo as formações Barra Velha e Ariri, ocorreu durante a fase de tectônica ativa, mas subdividem-na em três fases distintas (Figura 6). A fase rifte inferior está associada à segmentação da Formação Camboriú e à deposição da Formação Piçarras, controladas por falhas com direções SW–NE e N–S, já a fase rifte superior corresponde à deposição da Formação Itapema e da porção inferior da Formação Barra Velha, igualmente influenciada por sistemas de falhas de orientação SW–NE. Por fim, a fase tardia do rifte ocorreu durante a deposição da porção superior da Formação Barra Velha, estando relacionada a falhas com direção predominante SE–NW, exibindo, deste modo, uma maior complexidade estrutural na área.

Na proposta mais recente, de Dehler *et al.* (2024), esses mecanismos tectônicos são agrupados em duas fases evolutivas, rifte I e II (Figura 6). O Rifte I corresponde a fase associada à maior atividade das falhas e é sucedida pelo Rifte II, um período de relativa quiescência, no qual a atividade tectônica, apesar de presente, é mais restrita na bacia e/ou menos intensa.

Segundo esses modelos tectono-estratigráficos mais recentes, o intervalo pré-sal apresenta uma estruturação complexa, marcada por falhas ativas durante sua deposição e pela atuação de eventos magmáticos no Barremiano e no Aptiano. Esses eventos estão relacionados aos magmatismos Tupi, Parati e Sul, *sensu* Dehler *et al.*, 2024, desenvolvidos em um contexto de ambiente lacustre evaporítico.

Quando o assunto é a sedimentação da fase drifte, que se estende desde o Albiano até o recente, Moreira *et al.* 2007 admitem que é uma fase de aquiescência tectônica, que corresponde à evolução da bacia para uma margem passiva. Nessa fase evolutiva, a disposição dos depósitos passou a ser condicionada tanto pela flexura do embasamento, resultante de subsidência térmica, quanto pela tectônica do sal (Caldas e Zalán, 2009).

Quanto ao preenchimento da Bacia de Santos, na base da sucessão ocorrem os basaltos toleíticos da Formação Camboriú, dispostos sobre o embasamento pré-cambriano (Moreira *et al.*, 2007). Sobre essa unidade, a Formação Piçarras registra a deposição desde o estágio inicial até o clímax tectônico da fase rifte (Figura 6), sendo caracterizada por depósitos conglomeráticos e arenosos polimíticos, associados a porções proximais de leques aluviais, além de rochas finas de composição talco-stevensítica, formadas em sistemas lacustres (Moreira *et al.*, 2007), que conforme Leite *et al.*, (2020), estiveram fortemente influenciados por fluidos hidrotermais e atingiram condições de alta alcalinidade.

No entanto, propostas mais recentes (*e.g.*, Amorim *et al.*, 2025) indicam que a sucessão é dominada por intercalações de folhelhos siliciclásticos, folhelhos calcários e laminitos, além de *packstones* bioclásticos fragmentados (coquinas) e rochas ressedimentadas híbridas contendo minerais de argila magnesianas depositadas em ambiente lacustre relativamente profundo, abaixo da influência da retrabalhação pelas ondas.

Entre o Barremiano Superior e o Aptiano Inferior, durante os estágios finais de subsidência mecânica, ocorreu a deposição da Formação Itapema (Figura 6). Essa unidade é limitada na base pela Discordância Pré-Jiquiá, que separa os depósitos da Formação Itapema daqueles subjacentes da Formação Piçarras. A Formação Itapema é caracterizada por coquinas intercaladas com folhelhos ricos em matéria orgânica, cuja sedimentação está intimamente associada à extensos sistemas lacustres de rifte, os quais apresentavam condições de alcalinidade menores quando comparadas com às da Formação Piçarras (Freitas *et al.*, 2022; Chinelatto *et al.*, 2020; Moreira *et al.*, 2007).

Entre o Eoaptiano ao Neoaptiano, foram depositados os folhelhos e os carbonatos não marinhos da Formação Barra Velha, associados a um ambiente lacustre com alta circulação de CO₂, alcalinidade e sílica dissolvida (Wright e Barnett, 2015). Dispostos sobre a Formação

Barra Velha, ocorrem os depósitos evaporíticos da Formação Ariri (Figura 6), constituída por anidrita, halita e sais de *bittern* como carnalita, taquidrita e silvita, e representando uma importante incursão marinha na Bacia de Santos (Gonzaga *et al.*, 2024; Davison *et al.*, 2012).

Além da discordância Pré-Alagoas, que marca o início da deposição da Formação Barra Velha, Moreira *et al.* (2007) identificaram a discordância intra-Alagoas, a qual foi utilizada por autores como Minzoni *et al.* (2021), Barnett *et al.* (2021), Farias *et al.* (2019) e Buckley *et al.* (2015), e como referência para subdividir a Formação Barra Velha em dois intervalos (inferior e superior). O intervalo inferior estaria associado a uma fase sin-rifte tardia, enquanto o superior é relacionado com a fase pós-rifte (Figura 6).

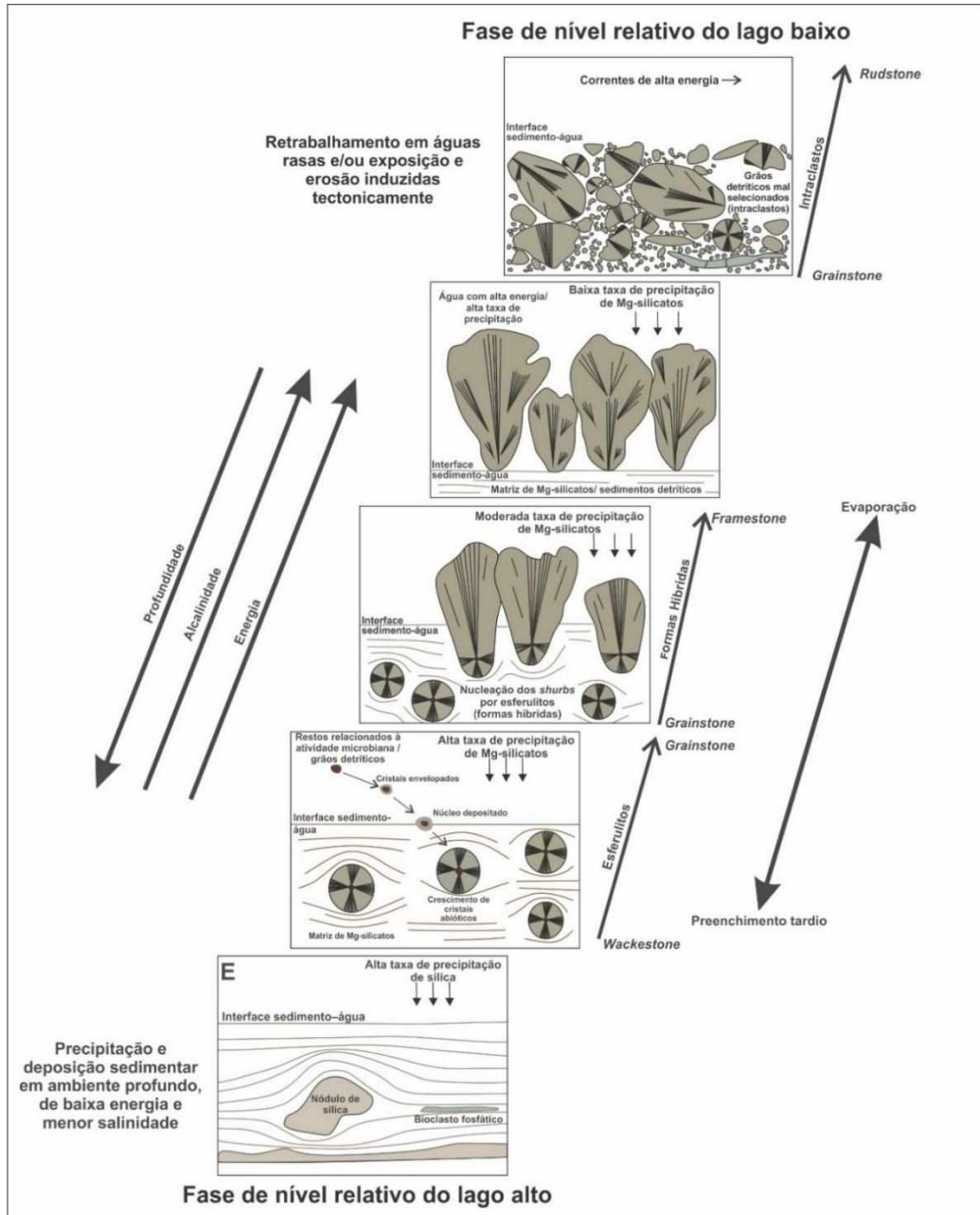
4.1 Formação Barra Velha

A Formação Barra Velha (Aptiano da Bacia de Santos – Figura 6) é composta predominantemente por carbonatos não marinhos, associados à deposição em extensos lagos rasos e hipersalinos, com predomínio de condições alcalinas, em um clima quente e árido (Araújo *et al.*, 2024; Pietzsch *et al.*, 2018; Tedeschi, 2017; Wright e Barnett, 2015). Esses carbonatos são caracterizados por texturas singulares no registro geológico, que têm alimentado intensos debates acerca da gênese dessas rochas e representam um desafio tanto para sua classificação quanto para a definição de uma nomenclatura adequada.

Autores como Muniz e Bosence (2015), Terra *et al.* (2010), Moreira *et al.* (2007) e Dias (1988) interpretaram as texturas incomuns das rochas da Formação Barra Velha como evidência de uma fábrica microbiana. Com base nisso, Moreira *et al.* (2007) adotaram termos como calcários estromatolíticos e laminitos microbiais, enquanto Terra *et al.* (2010), adotaram nomenclaturas descritivas como estromatólito, dendrolito e leiolito, classificações que atribuem caráter genético para as rochas.

Essa classificação foi contestada quando Wright e Barnett (2014, 2015), propuseram uma origem abiótica para os carbonatos e silicatos de magnésio da Formação Barra Velha, sugerindo que estes teriam precipitado de maneira abiótica em um lago alcalino e hipersalino. Diversos autores ratificam essa proposição (q.v. Azerêdo *et al.*, 2021; Basso *et al.*, 2020, Wright, 2020; Lima e De Ros, 2019; Herlinger *et al.* 2017), admitindo que a Formação Barra Velha é formada por um ciclotema de fácies formadas *in situ*, cuja variação textural ocorre como consequência de oscilações no nível do lago (Figura 7).

Figura 7: Modelo esquemático de evolução das principais texturas observadas na Formação Barra Velha. O modelo reúne conceitos e elementos propostos em diversos estudos sobre os carbonatos da fase de subsidência do pré-sal do Atlântico Sul, destacando processos associados à redução da salinidade das águas lacustres.



Fonte: Adaptado de Basso *et al.* (2020).

Já autores como Figueiredo *et al.* (2025) e Erthal *et al.* (2017) identificaram similaridades entre a petrografia das rochas da Formação Barra Velha com aquelas presentes em travertinos modernos. Segundo estes autores, as diferentes formas dos elementos do pré-sal refletem a influência combinada do fluxo de água, da evaporação e da atividade microbiana, indicando uma origem múltipla. Esse entendimento é ratificado por Ferreira *et al.* (2025), que

reconhecem pontualmente remanescentes orgânicos e evidências de atividade microbiana, como estruturas em forma de domo e laminações crenuladas, ao longo da Formação Barra Velha.

Em face dessas discussões sobre a gênese dessas rochas e do avanço no entendimento de seus componentes, novas abordagens de classificação e nomenclatura foram propostas na literatura (e.g., Borghi *et al.*, 2022; De Ros e Oliveira, 2023; Gomes *et al.*, 2020;), introduzindo formalmente termos como “*shrubstones*” e “*spherulestones*” para sua designação, os quais não possuem necessariamente uma conotação genética, havendo apenas a distinção entre constituintes ortoquímicos e aloquímicos.

Apesar das discussões, o modelo de precipitação puramente abiótica (*sensu* Wright e Barnett, 2014, 2015) é o mais difundido na literatura. De modo geral, os autores concordam que estruturas microbianas são raras na unidade, mas admitem que essa influência é mais marcada e notável no topo da Formação Barra Velha, próximo ao contato com a espessa camada de sal, no intervalo conhecido informalmente como Marco Lula (Plantz *et al.* 2024; Rebelo *et al.*, 2022; Carvalho e Fernandes, 2021; Souto, 2010 – Figura 7).

Deste modo, admite-se que o Marco Lula, foco deste estudo, constitui uma exceção ao modelo predominantemente abiótico de Wright e Barnett (2014, 2015). Autores como da Silva *et al.* (2025), Plantz *et al.* (2024), Pietzsch *et al.* (2020), Wright (2020, 2018), Lima e De Ros (2019), Saller *et al.* (2016) e Souto (2010), descrevem, neste intervalo, estruturas (e.g., laminações crenuladas e *microbial lumps*) que indicam que a precipitação carbonática pode ter sido diretamente induzida pelo metabolismo bacteriano.

Araújo *et al.* (2024) são mais enfáticos ao reforçar essa interpretação. Os autores assumem que o Marco Lula é caracterizado por estromatólitos híbridos, formados pela combinação de processos químicos e microbianos em um ambiente lacustre raso. Neste contexto, observa-se, o estabelecimento de condições regressivas, sob clima extremamente árido, com aumento expressivo da alcalinidade e suscetibilidade a frequentes episódios de exposição subaérea.

Já para da Silva *et al.* (2025), o desenvolvimento das planícies microbianas só foi possível a partir das primeiras incursões marinhas na bacia. A entrada de águas marinhas teria reduzido significativamente o pH do sistema lacustre originalmente alcalino, criando condições mais favoráveis ao metabolismo microbiano e à formação das esteiras.

Apesar de sua importância estratigráfica e do debate acerca da influência microbiana em sua gênese, a caracterização geoquímica sistemática do Marco Lula permanece incipiente. Alguns autores (e.g., dos Santos *et al.*, 2025 e Lima e De Ros, 2019) descrevem uma assembleia

comum de elementos para o Marco Lula, a mesma encontrada para a Formação Barra Velha (*e.g.*, Mg, Al, Si, S, K, Ca, Fe e Ba) e relacionam tanto com constituintes primários (carbonatos, argilominerais e minerais detríticos) quanto à evolução diagenética e atividades hidrotermal.

Entretanto, no que se refere especificamente ao Marco Lula, essas informações ainda carecem de maior refinamento, sobretudo no que diz respeito à distribuição vertical dos elementos e sua relação com processos deposicionais e pós-deposicionais.

5. RESULTADOS

5.1 Caracterização textural do Marco Lula

O Marco Lula identificado nos poços A, B e C (Figura 2) é caracterizado por uma associação de litologias formadas *in situ* e retrabalhadas, conforme ilustrado nos perfis litológicos (Figuras 8, 9 e 10).

Dentre as litologias formadas *in situ*, dominantes no Marco Lula, destacam-se os calcilutitos (CLU), *spherulestones* (SPH) e *shrubstones* (SHB), sendo os CLU particularmente relevantes pela textura e estruturas sedimentares que apresentam. As litologias retrabalhadas, por sua vez, são representadas pelos calcarenitos (CRE) e calcirruditos (CRU), os quais aparecem em proporções iguais nos três poços.

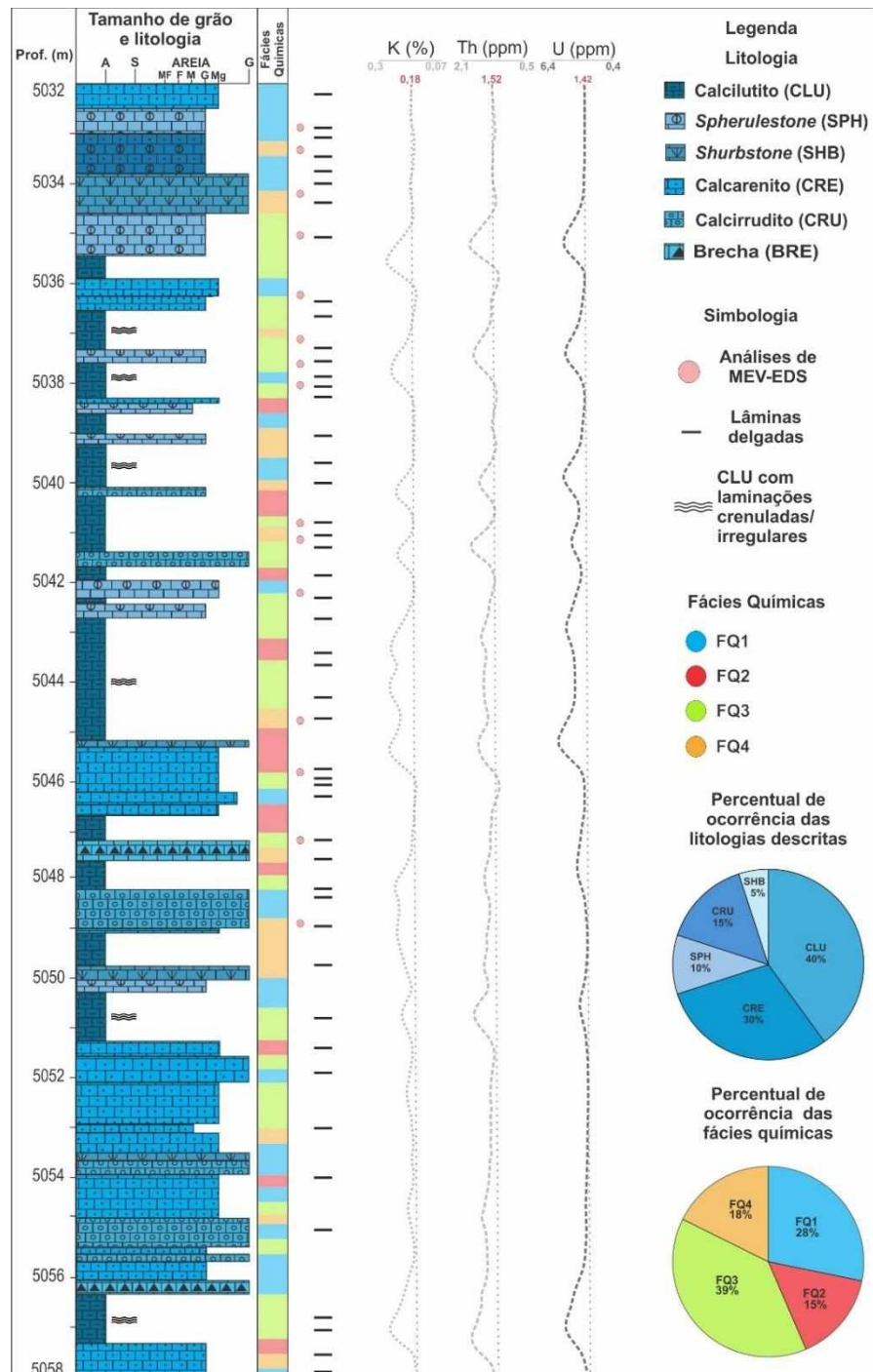
5.1.1 Rochas carbonáticas formadas *in situ*

5.1.1.1 Calcilutitos (CLU)

Os CLU constituem uma das litologias mais recorrentes no intervalo analisado. Em razão do reduzido tamanho das partículas que os compõem, os principais aspectos macroscópicos observados são as laminações e as variações de cor (Figuras 11A, 12A e 13A).

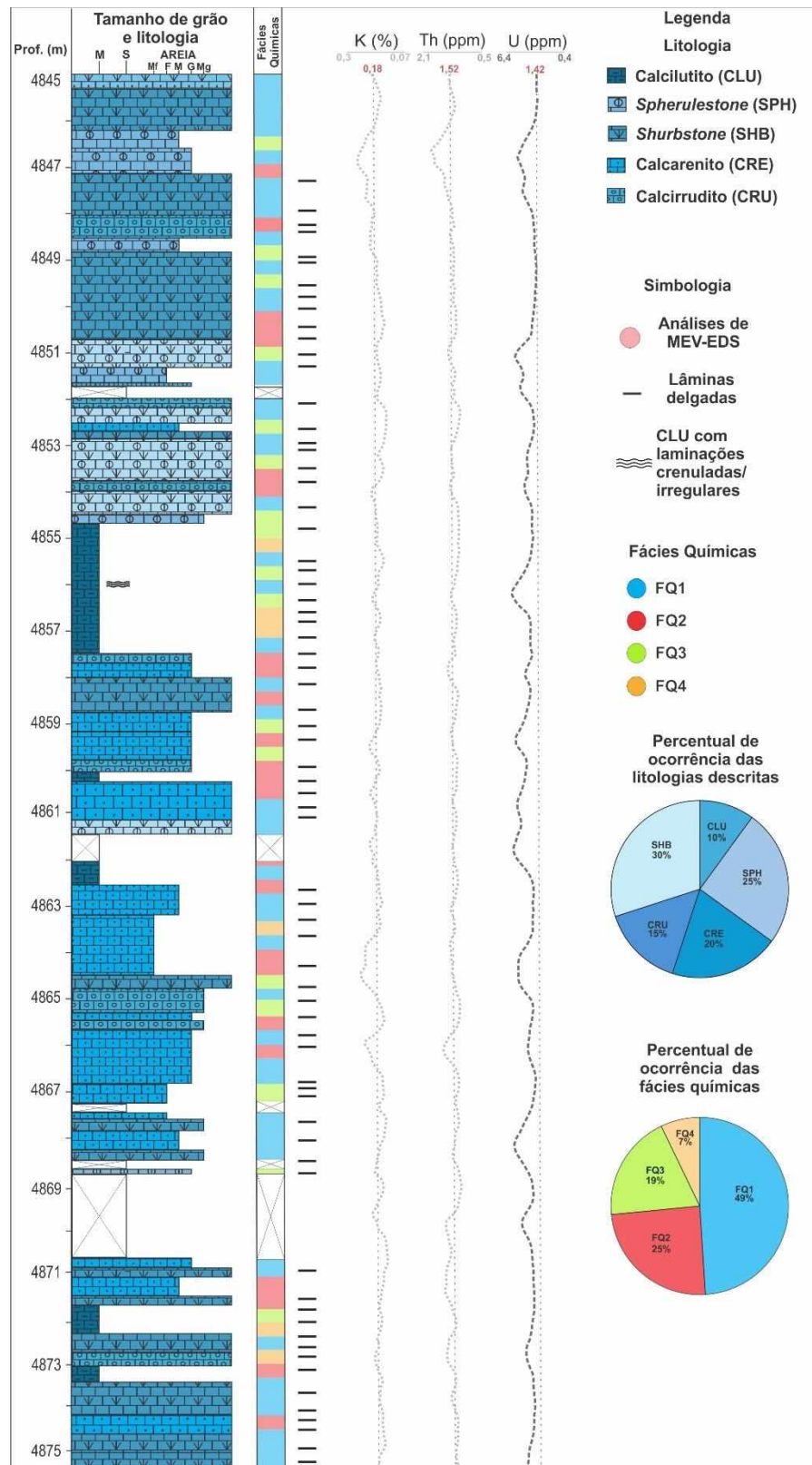
Além disso, a intensa modificação pós-deposicional dificulta a diferenciação de componentes que permitam afirmar com clareza se os CLU foram formados *in situ* ou se seus constituintes foram transportados/ retrabalhados. Admite-se, neste estudo, que grande parte dos CLU descritos são litotipos formados *in situ*. Sem excluir a possibilidade de que, em alguns intervalos, especialmente aqueles que apresentam CLU com laminações plano-paralelas, possam ser caracterizados como litotipos retrabalhados, semelhantes àqueles recentemente descritos por de Negri *et al.* (2025) e Terra *et al.* (2023).

Figura 8: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço A (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e das análises de MEV-EDS, além do percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas.



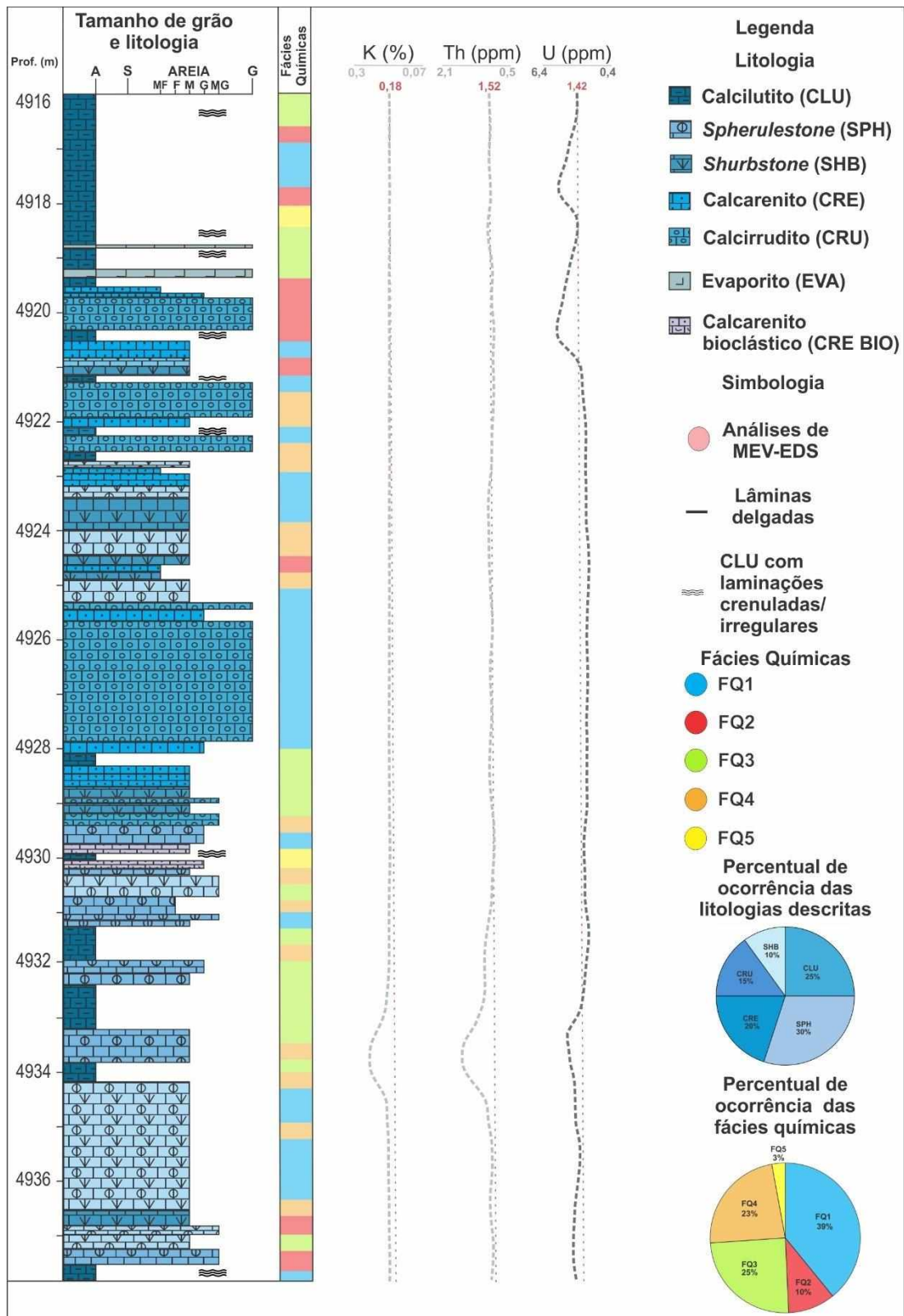
Fonte: A autora (2026).

Figura 9: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço B (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e o percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas.



Fonte: A autora (2026).

Figura 10: Perfil litológico simplificado do Marco Lula no poço C (escala 1:100). Destacam-se as diferentes litologias descritas, as fácies químicas, o padrão característico das curvas de raios gama espectral do intervalo, a média do gama espectral (linha tracejada em vermelho), a distribuição das lâminas petrográficas e das análises de MEV-EDS, além do percentual de ocorrência de cada litologia e das fácies químicas.



Fonte: A autora (2026).

Dito isto, destaca-se que a proporção de ocorrência, a espessura das camadas e a distribuição vertical dos CLU, apresentam variações relevantes entre os três poços estudados (Figuras 8, 9 e 10). No poço A, os CLU constituem a litologia mais abundante, correspondendo a aproximadamente 40% da sucessão. Ocorrem em camadas com espessuras variando entre 40 cm e 3 m, sendo 40 cm a espessura modal (Figura 8). Essas rochas exibem laminações contínuas, geralmente irregulares e, por vezes, crenuladas, com coloração predominantemente amarronzada (Figura 11A).

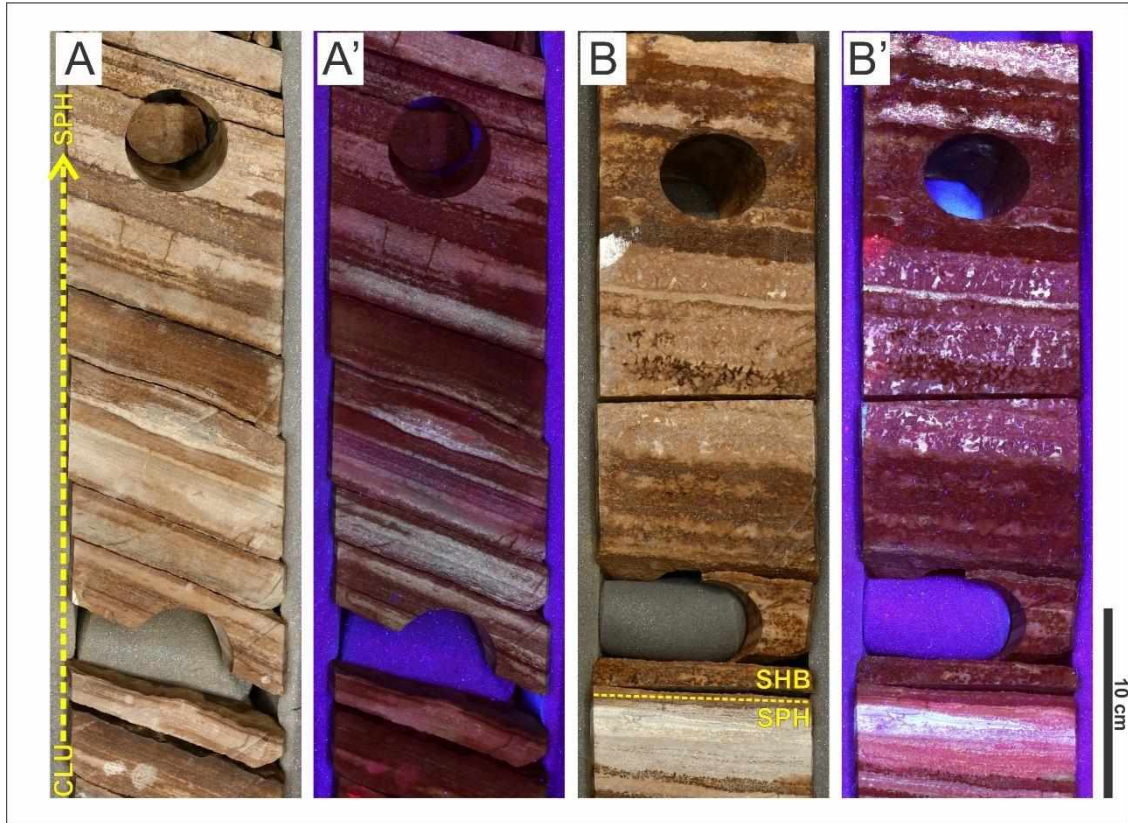
No poço B, os CLU são menos frequentes, representando cerca de 10% da sucessão, e apresentam camadas com espessura média de 40 cm, podendo localmente atingir até 3 m (Figura 9). São bastante similares aos CLU do poço A (Figura 12A), contudo laminações plano-paralelas são mais frequentes no poço B, enquanto laminações contínuas e irregulares ou crenuladas ocorrem de forma mais localizada, concentrando-se no intervalo localizado entre cerca de 4.855 e 4.857 m (Figura 9).

No poço C, os CLU representam aproximadamente 25% do Marco Lula e ocorrem em camadas com espessuras médias de 30 a 40 cm, concentradas no topo da sucessão (Figura 10). São rochas com laminações contínuas, irregulares e plano-paralelas, e de tonalidade amarronzada, similares às descritas para os poços A e B. Entretanto, alguns níveis, localizados entre 4.930 e 4.934 m, apresentam laminações plano-paralelas esverdeadas, sugerindo uma possível variação composicional (Figura 13A).

De modo geral, os CLU preservam suas estruturas deposicionais, entretanto, do ponto de vista composicional, encontram-se intensamente substituídos por constituintes diagenéticos, sobretudo dolomita e sílica. Comparativamente, os poços A, B e C apresentam dolomitização intensa; contudo, no poço A, além da dolomita, a presença de sílica ganha relevância devido à intensidade.

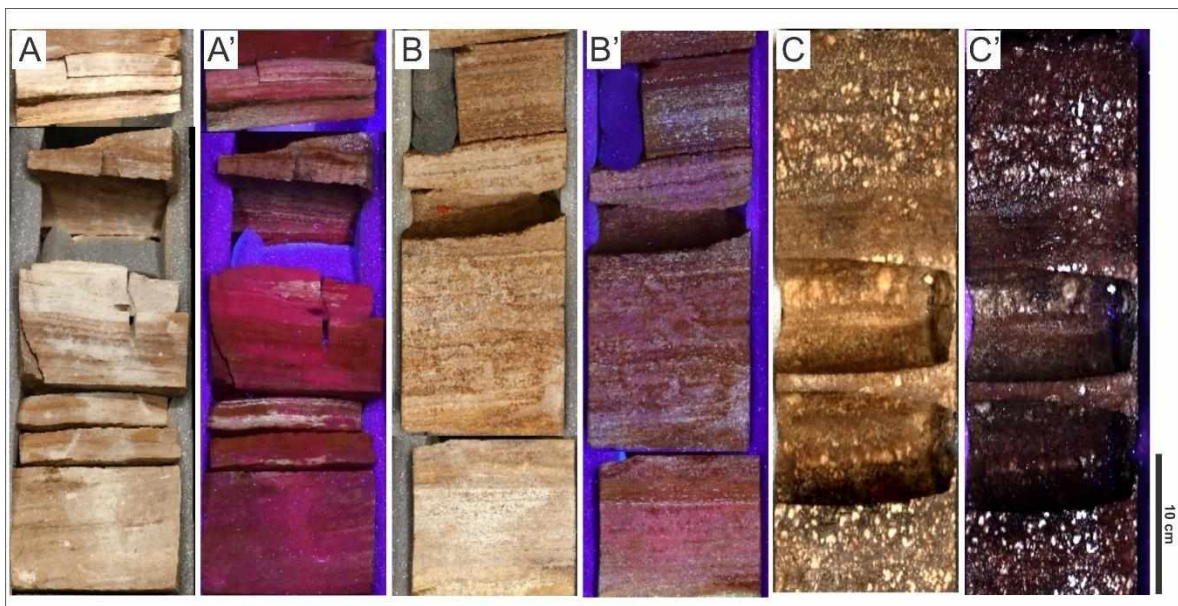
Macroscopicamente, a sílica ocorre de duas formas principais ao longo dos três poços: (i) em níveis tabulares, com espessuras de até 10 cm, acompanhando a orientação preferencial das laminações; e (ii) como nódulos irregulares, arredondados ou esféricos, que localmente deformam ou obliteram a laminação original da rocha. Ao longo das sucessões analisadas a sílica tabular ocorre associada preferencialmente aos CLU, enquanto a sílica nodular está presente nos CLU e em todas as demais litologias descritas.

Figura 11: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço A. (A) CLU laminado gradando verticalmente para SPH laminado e (B) Contato entre SPH e SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B').



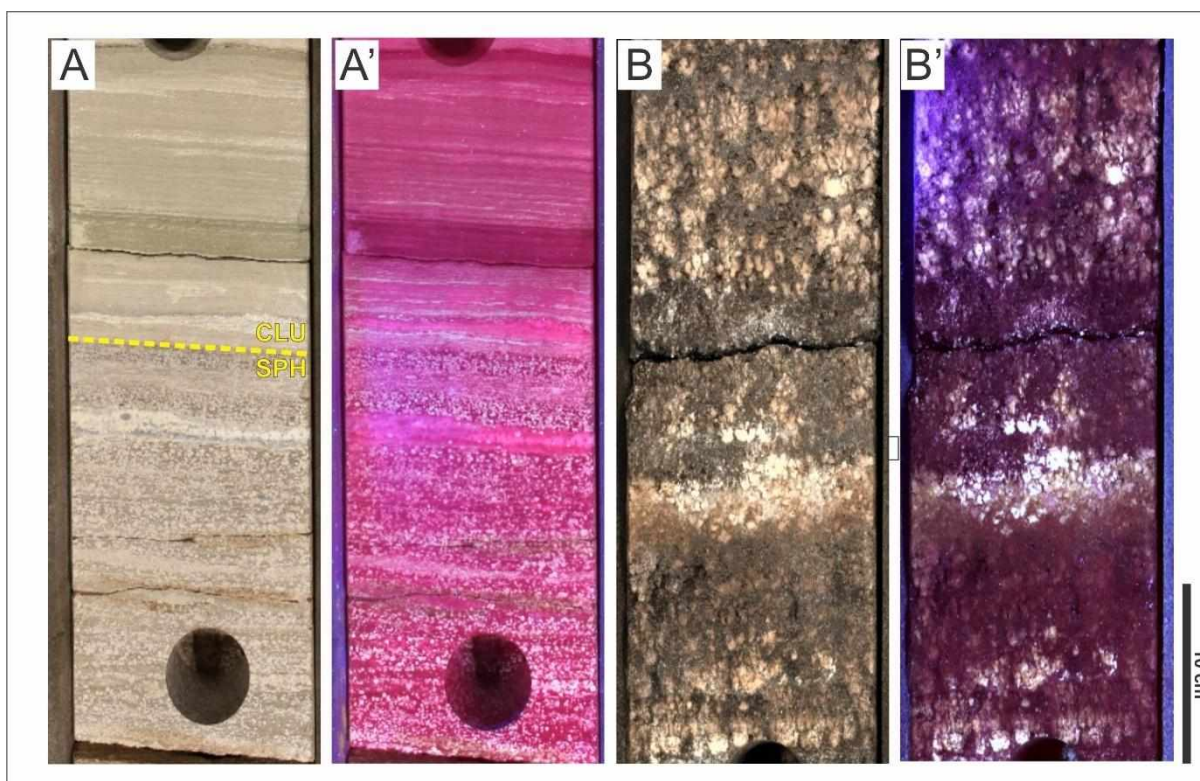
Fonte: A autora (2026).

Figura 12: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço B. (A) CLU laminado, (B) SPH e (C) SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A'), (B') e (C').



Fonte: A autora (2026).

Figura 13: Principais aspectos macroscópicos das rochas formadas *in situ* no Marco Lula do poço C. (A) CLU laminado no topo e SPH na base, (B) SHB. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B').



Fonte: A autora (2026).

Também relacionado à silicificação pervasiva nos CLU, nos poços A e C observa-se a ocorrência de brechas intraformacional, caracterizadas por fraturamento e rearranjo dos fragmentos da rocha original. A textura é predominantemente caótica, com contatos bruscos entre fragmentos angulosos a subangulosos, compostos preferencialmente por CLU e sílica. Os clastos variam de milimétricos a centimétricos e preservam parcialmente a laminação interna, embora, em muitos casos, está se apresente deformada ou obliterada.

Uma feição que merece destaque e foi identificada exclusivamente no poço C é a ocorrência de evaporitos (Figura 10). Estes ocorrem no topo do poço C, entre aproximadamente 4.918 e 4.919 m, em três camadas centimétricas que se intercalam aos CLU com laminações irregulares.

Em lâminas petrográficas, os CLU do Marco Lula apresentam como característica comum a textura grumosa / peloidal e a intensa substituição dos seus constituintes primários por dolomita microcristalina, geralmente presente em percentuais geralmente superiores a 80%. Verifica-se, também, a ocorrência de dolomita mosaico e blocosa (Figuras 14A, 14C e 14E), como cristais anédricos a euédricos, finos a médios, em percentuais que não ultrapassam os 25%, e com menor frequência, tem-se dolomita lamelar. Esta ocorre em percentuais mais

modestos (5 – 10%), foi identificada de forma mais recorrente nos poços B e C e, comumente, é observada junto de cristais euédricos de dolomita romboédrica.

A sílica, quando presente, ocorre em percentuais bastante elevados, formando níveis e/ou nódulos irregulares, que podem representar até 50% da lâmina e, em algumas situações, substituem constituintes primários e dolomita. Apresenta-se em diferentes hábitos, predominando o quartzo microcristalino, seguido por variedades macrocristalinas (mosaico e prismático) e calcedônia fibro-radiada (Figuras 14B, 14D e 14F) frequentemente associados à cimentação ou preenchendo poros e fraturas.

Além do detalhamento composicional, as lâminas petrográficas permitem realizar uma distinção mais assertiva entre CLU com laminações regulares (plano-paralelas – Figuras 15A, 15C e 15E) e CLU com laminações irregulares a crenuladas (Figuras 15B, 15D e 15F), revelando que laminações irregulares a crenuladas são expressivas no Marco Lula, sendo a estrutura dominante no poço A e ocorrendo de forma significativa nos demais poços analisados. Adicionalmente, verifica-se que as laminações são contínuas, com espaçamento variando entre 0,1 e 0,5 mm e são evidenciadas pela alternância de cores (Figura 15), possivelmente relacionada com variações composicionais.

As lâminas também evidenciam CLU peloidal com esferulitos e, mais raramente, CLU peloidal com esferulitos e *shrubs*, estes últimos, podem aparecer coalescidos, formando crostas. No geral, a relação desses constituintes com os CLU, representa mais uma evidência de contato gradacional entre as litologias formadas *in situ*, algo também observado nas descrições de testemunhos (*e.g.*, Figura 10A).

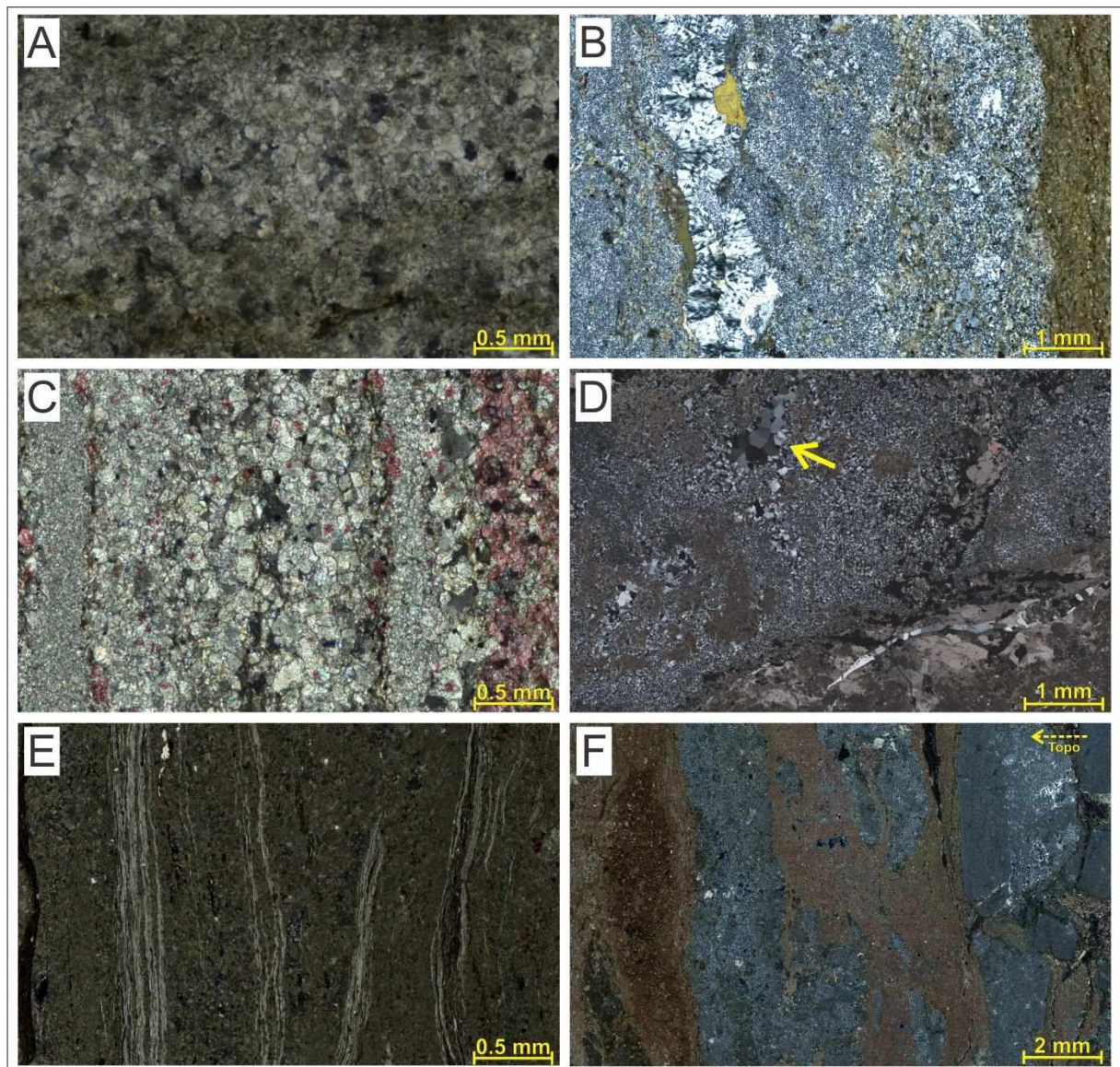
5.1.1.2 *Spherulestones* (SPH)

Os SPH constituem a litologia mais abundante do Marco Lula no poço C, onde representam até 30% da sucessão analisada e ocorrem em camadas delgadas, com espessura de até 60 cm, distribuídas ao longo de todo o intervalo (Figura 10). Nos poços A e B, essa litologia corresponde a cerca de 10% e 25% das sucessões, respectivamente, formando camadas que atingem até 90 cm de espessura concentradas no topo do intervalo (Figuras 8 e 9).

Trata-se de rochas compostas por esferulitos com granulometria variando de areia fina a areia grossa, que podem ocorrer dispersas ou coalescidas, com proporções variáveis de matriz fina (Figuras 11B, 12B e 13B). Nos três poços analisados, os SPH estão frequentemente associados aos CLU, sendo comum observar um aumento gradual da abundância de esferulitos nos CLU até a formação de SPH (Figura 11A). Como resultado, são recorrentes camadas de

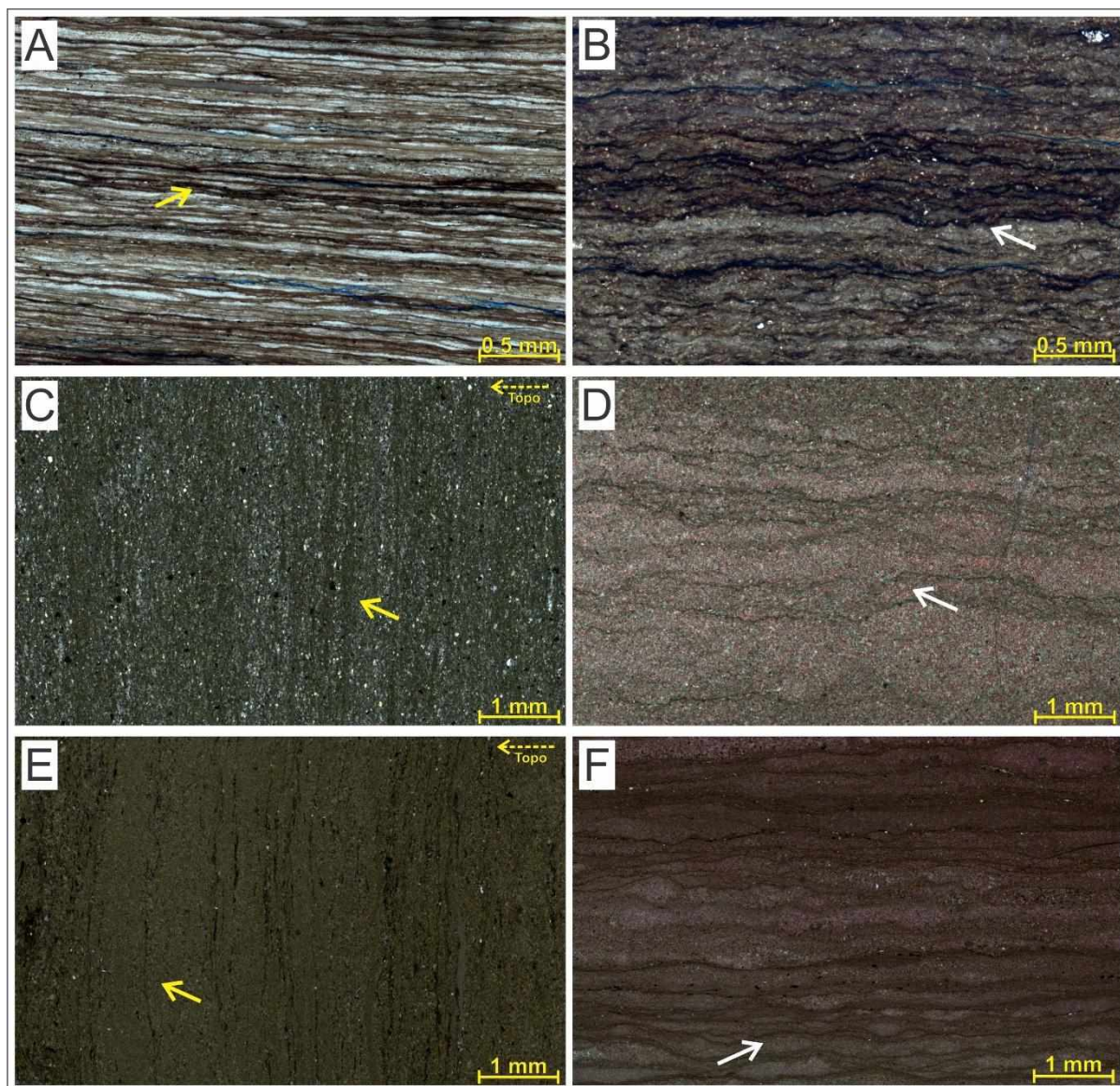
SPH com laminações irregulares, bastante semelhantes às descritas nos CLU, além de níveis maciços. Estes últimos são mais frequentes nos poços B e C, onde os esferulitos se encontram melhor desenvolvidos e são mais fáceis de identificar, tanto em escala macroscópica quanto microscópica.

Figura 14: Características composicionais observadas em lâminas petrográficas nos calcilutitos (CLU) do Marco Lula. (A, C e E) CLU intensamente substituído por dolomita mosaico e blocosa nos poços A, B e C, respectivamente; e (B, D e F) CLU com sílica micro e macrocristalina nos poços A, B e C. Em (B) a seta amarela indica a presença de calcedônia.



Fonte: A autora (2026).

Figura 15: Estruturas sedimentares observadas em lâminas petrográficas nos calcilutitos (CLU) do Marco Lula. (A, C e E) CLU com laminações regulares nos poços A, B e C, respectivamente (setas amarelas); e (B, D e F) CLU com laminações irregulares nos poços A, B e C, respectivamente (setas brancas).



Fonte: A autora (2026).

Em lâminas petrográficas, os esferulitos exibem crescimentos fibrorradiais de cristais de calcita, total- ou parcialmente substituídos por dolomita (Figuras 16 e 17). Esses esferulitos apresentam uma granulometria média, ocasionalmente grossa, com até 1 mm de diâmetro, podem ocorrer coalescidos e aglutinados, formando texturas mais homogêneas e compactas (*e.g.*, Figura 16B); dispersas, com poros preenchidos por cimento (*e.g.*, Figura 16D); e, também, associadas a uma matriz fina, normalmente amarronzada e substituída por dolomita. Nestes casos, é comum observar o esferulitos deslocando matriz argilosa, como ilustra a

Figura 17E. Em algumas lâminas, tem-se, ainda, a presença de *shrubs* arborescentes e/ou arbustiformes associados às esferulitos com tamanhos de até 2 mm.

Além da dolomita blocosa e/ou mosaico microcristalina que substitui a matriz argilosa e, por vezes, os esferulitos de calcita (*e.g.*, Figura 16A), os SPH dos três poços contêm dolomita em diferentes hábitos: mosaico, blocosa, lamelar, romboédrica e em franja (Figura 16). No poço C, destaca-se, a ocorrência de dolomita em sela, em proporções significativamente mais elevadas do que nos poços A e B, e comumente preenchendo poros. Adicionalmente, sílica está presente de forma pervasiva e irregular nas lâminas, frequentemente formando nódulos e franjas (Figura 17) e, localmente, substituindo esferulitos dolomitizados (*e.g.*, Figura 17B). Trata-se, na maioria das vezes, de quartzo microcristalino. Quartzo macrocristalino (mosaico), quando presente, ocorre em proporções inferiores enquanto calcedônia e esferulitos de sílica (Figura 17C) ocorrem de forma ainda mais restrita.

5.1.1.3 *Shrubstones* (SHB)

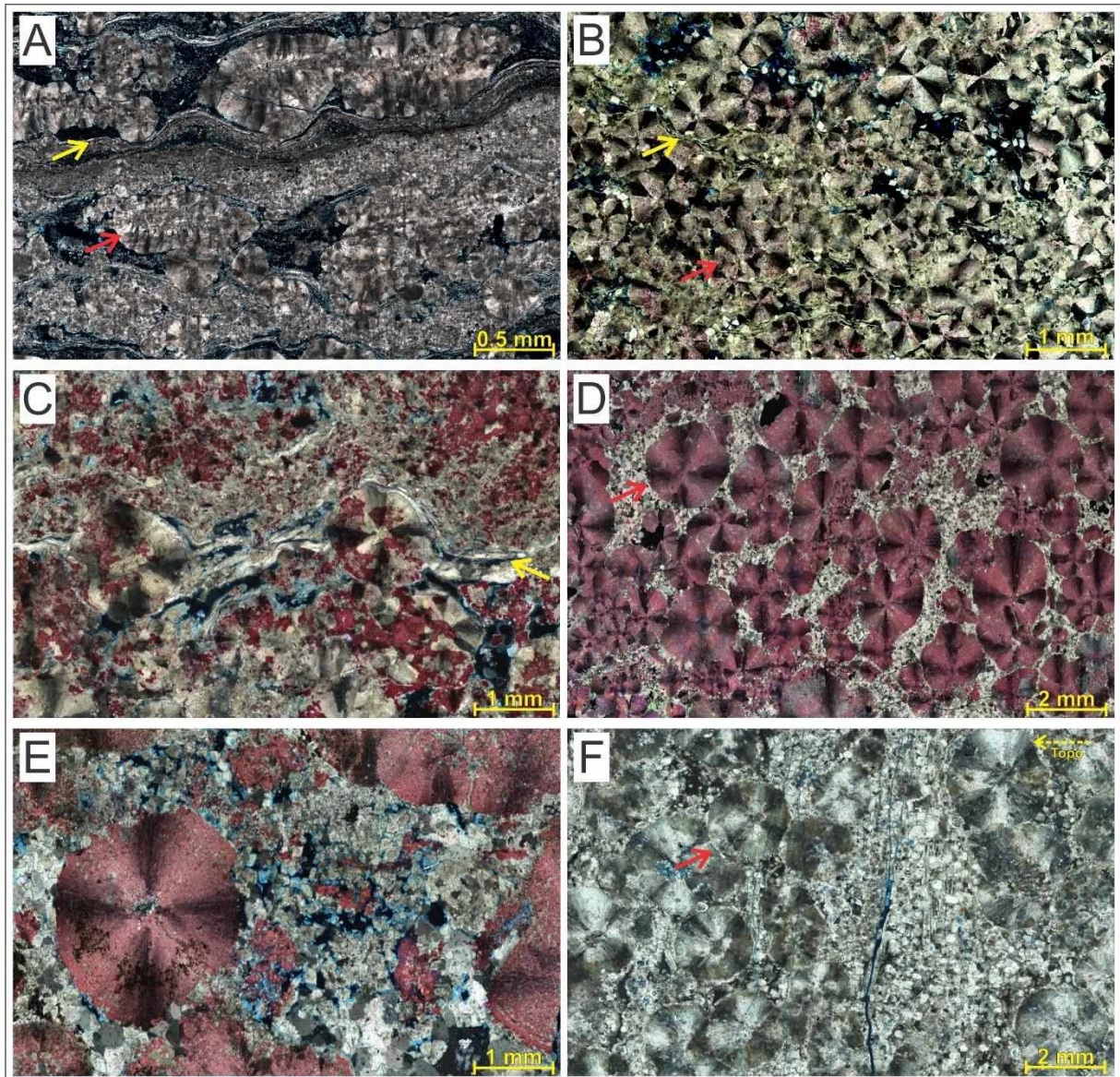
Os SHB, nos poços A e C, representam a litologia formada *in situ* menos recorrente (Figuras 8 e 10), contudo, chega a representar cerca de 30% do intervalo de estudo no poço B, sendo a litologia dominante (Figura 9). Ao longo do poço B, os SHB ocorrem em camadas com até 1,80 m de espessura distribuídas ao longo de todo o intervalo (Figura 9). No poço A, os SHB correspondem à litologia menos abundante, com um percentual de ocorrência inferior a 5%, e no poço C esse percentual não ultrapassa os 10%. Tanto no poço A quanto no poço C, as camadas são pouco espessas, com espessura modal de 20 cm no poço A (Figura 8) e variando entre 20 e 50 cm no poço C (Figura 10).

Os SHB são compostos essencialmente pelos *shrubs* (Figura 11B, 12C e 13B), ou seja, agregados de calcita com crescimento fascicular, que podem exibir estruturas diversas a depender da razão altura/largura (*cf.*, Claes *et al.*, 2017). Nos poços analisados, os SHB do Marco Lula atingem altura média de 4 mm e a largura normalmente varia em torno de 2 mm, sendo os morfotipos arborescente e dendriforme (razão altura/largura >1; Claes *et al.*, 2017) mais comumente descritos.

Em lâminas petrográficas, verifica-se que os *shrubs* ocorrem como feições individualizadas, coalescidas e/ou cimentadas (Figura 18). No poço A (Figuras 18A e B), a morfologia arborescente e dendriforme é comum, mas os *shrubs* também apresentam formas arbustiformes alongadas e em leque, ocorrendo em um arranjo denso a aberto, que, apesar de exibirem altura média similar aos *shrubs* arborescentes, são diferenciados pela relação

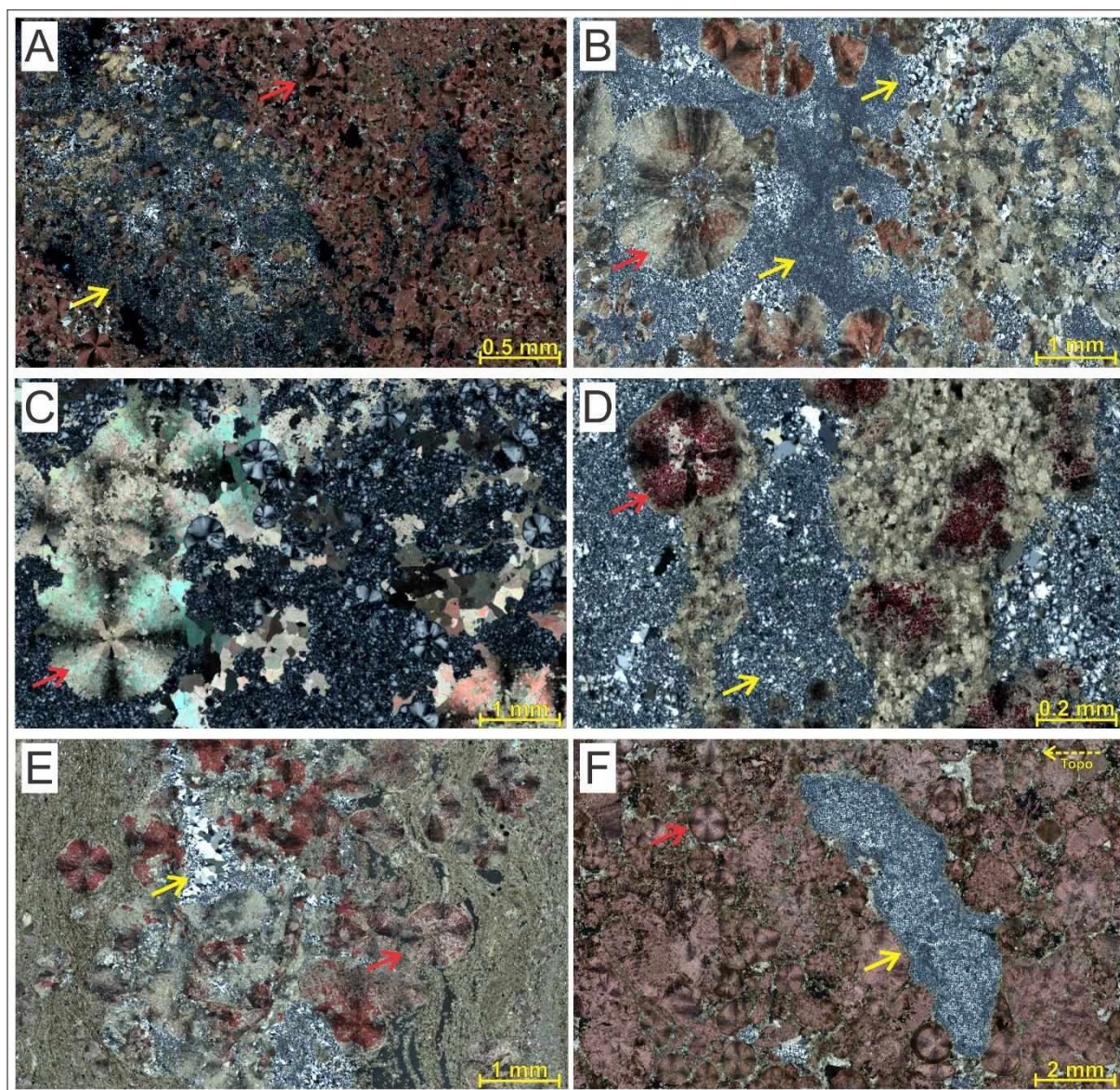
altura/largura ~ 1 (Claes *et al.*, 2017). Além destes, os *shrubs* podem ocorrer como crostas fasciculares (*crustose sensu* Borghi *et al.*, 2022).

Figura 16: Características dos *spherulestones* (SPH) do Marco Lula em lâmina petrográfica. (A) SPH com esferulitos coalescidos (seta vermelha) em matriz argilosa e dolomita lamelar; (B) SPH com esferulitos coalescidos (seta vermelha), bordeadas por dolomita lamelar; (C) SPH em matriz argilosa, parcialmente substituída por dolomita lamelar; (D–E) SPH com esferulitos (seta vermelha) dispersos e intensa cimentação por dolomita em mosaico; (F) SPH intensamente dolomitizado, com desenvolvimento de dolomita romboédrica. As setas amarelas indicam dolomita lamelar.



Fonte: A autora (2026).

Figura 17: Características petrográficas dos *spherulestones* (SPH) do Marco Lula, na presença de sílica (setas vermelhas). Note que em (A) a seta amarela indica a ocorrência de sílica microcristalina e em (B, D e E) tem-se, além da sílica microcristalina, sílica macrocristalina (menos abundante). Com destaque em (B) para a sílica substituindo esferulitos, em (E) para a relação do esferulitos com a matriz argilosa. Em (C) observa-se a presença de esferulitos de sílica e em (F) tem-se um nódulo de sílica microcristalina (seta amarela).



Fonte: A autora (2026).

No poço B (Figuras 18C e D), apresentam-se similares aos descritos para o poço A, no entanto, formas dendriformes são mais recorrentes e, mesmo que localmente, exibem morfotipos colunares, que ocorrem como estruturas verticais, com colunas simples e/ou bifurcadas e laminação interna e ainda ocorre associados a esferulitos. No poço C (Figuras 18E e F), apresentam-se, também, como arbustos em arranjos densos ou como agregados fasciculares de calcita em leque, além de exibirem, ocasionalmente, *shrubs* com laminação interna.

Em termos composicionais, os SHB apresentam variações significativas, podendo exibir a preservação de calcita ou apresentarem dolomita em elevados percentuais, tanto como cimento, preenchendo poros intra- e intershrubs, quanto substituindo os *shrubs*, o que dificulta a observação de sua estrutura interna. Neste caso, tem-se essencialmente dolomita microcristalina (*e.g.*, Figuras 18B e 18C); já nos poros, a dolomita pode apresentar diferentes hábitos, sendo a dolomita mosaico, blocosa (*e.g.*, Figura 18F) e, principalmente, a romboédrica (*e.g.*, Figura 18E) as mais comuns. A sílica ocorre principalmente no poço A, tanto como quartzo microcristalino quanto como quartzo macrocristalino (*e.g.*, Figura 18A), preenchendo poros da rocha.

5.1.2 Rochas carbonáticas retrabalhadas

5.1.2.1 Calcarenitos (CRE)

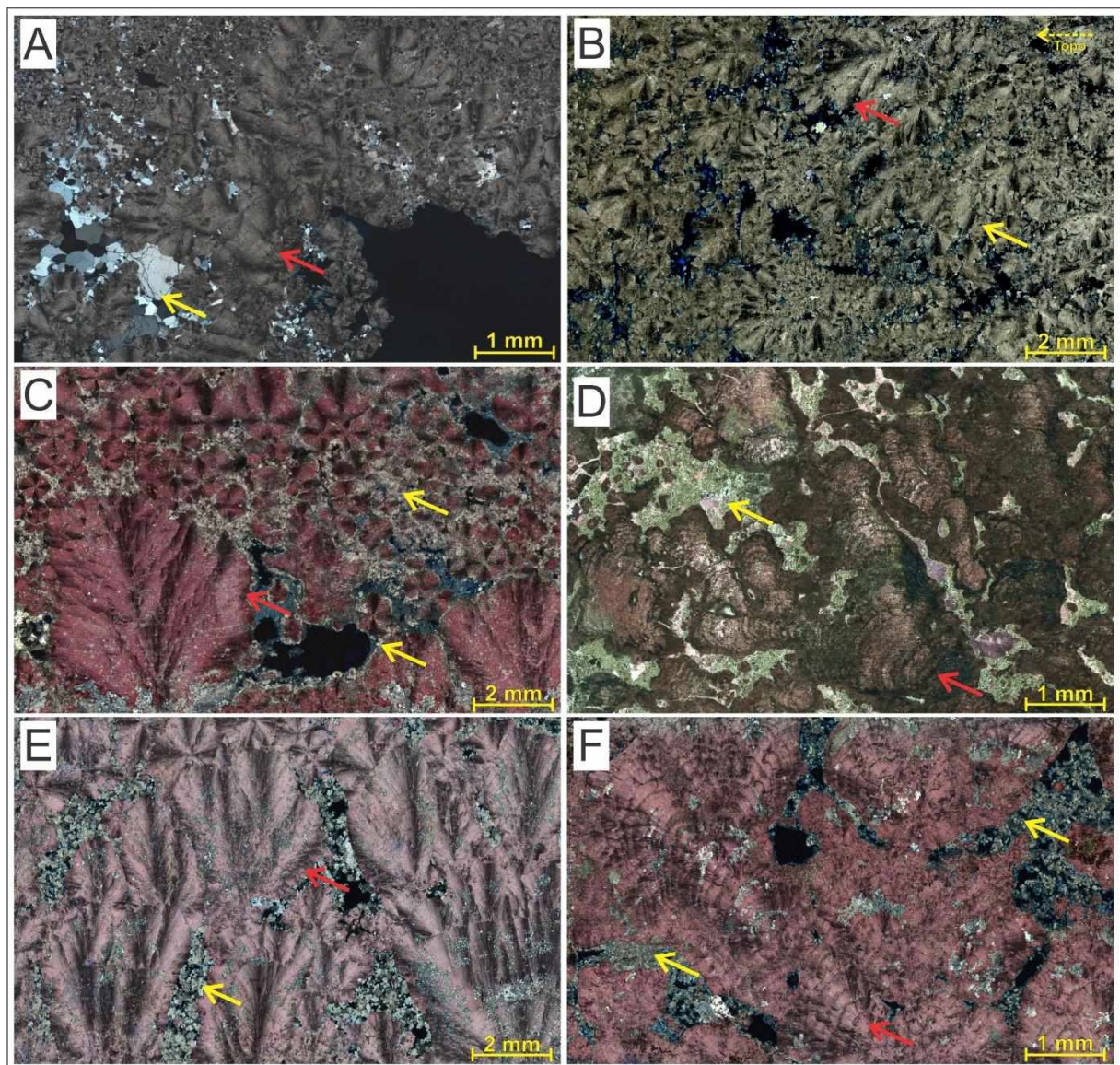
No poço A, os CRE constituem a segunda litologia mais abundante do intervalo estudado, representando cerca de 30% da sucessão. Ocorrem em camadas métricas, de até 4 m de espessura, concentradas principalmente na base do Marco Lula, entre 5.051,3 e 5.053,6 m (Figura 8), onde se intercalam com CRU apresentando contatos graduais. No poço B, os CRE também são expressivos, correspondendo a aproximadamente 20% da sucessão. Estão presentes em camadas com espessura média de 50 cm, distribuídas preferencialmente entre 4.859 e 4.868 m e intercaladas sobretudo com CRU e, em menor proporção, com SHB (Figura 9). No poço C, os CRE representam igualmente cerca de 20% da sucessão, ocorrendo como camadas delgadas, em geral de 20 cm de espessura, concentradas nas porções superiores do intervalo (Figura 10).

Os CRE exibem granulometria variando entre fina e grossa, são preferencialmente maciços (Figuras 19A, 20A e 21A), sendo raros os níveis que exibem laminações plano-paralelas incipientes. Gradação normal pode ser observada localmente, enquanto gradação inversa é ainda mais rara. Trata-se de rochas mal a moderadamente selecionadas, constituídas, essencialmente, por clastos carbonáticos indiferenciados, angulosos a arredondados.

Nos poços A, B e C, as lâminas petrográficas revelam, além de clastos carbonáticos indiferenciados (Figura 22), a presença de intraclastos de SPH e SHB (Figuras 22E e 22F), bem como fragmentos de rochas vulcânicas (Figura 21B). Esses fragmentos são mais frequentes no poço A, onde apresentam coloração predominantemente preta e podem ser encontrados nos CRE presentes ao longo de todo o intervalo de estudo. Nos poços B e C, os clastos vulcânicos

são menos comuns ou até ausentes em determinados intervalos. No poço B, eles foram registrados apenas nos CRE entre as profundidades de 4.859 e 4.868 m (Figura 9). Já no poço C, a ocorrência é ainda mais restrita, limitada aos CRE que ocorrem entre 4.919 e 4.922 m (Figura 10).

Figura 18: Características microscópicas dos *shrubstones* (SHB) do Marco Lula (setas vermelhas), com destaque para a morfologia dos *shrubs* nos poços A (A e B), B (C e D) e C (E e F). Em (A) tem-se agregados de fasciculares e quartzo macrocristalino preenchendo poros (seta amarela), em (B, C e E) *shrubs* em forma de leque substituídos por calcita (seta amarela), em (D e F) *shrubs* dendrifomes agregados calcíticos com cimentação dolomítica (seta amarela), com destaque em (E) para a dolomita romboédrica (seta amarela).



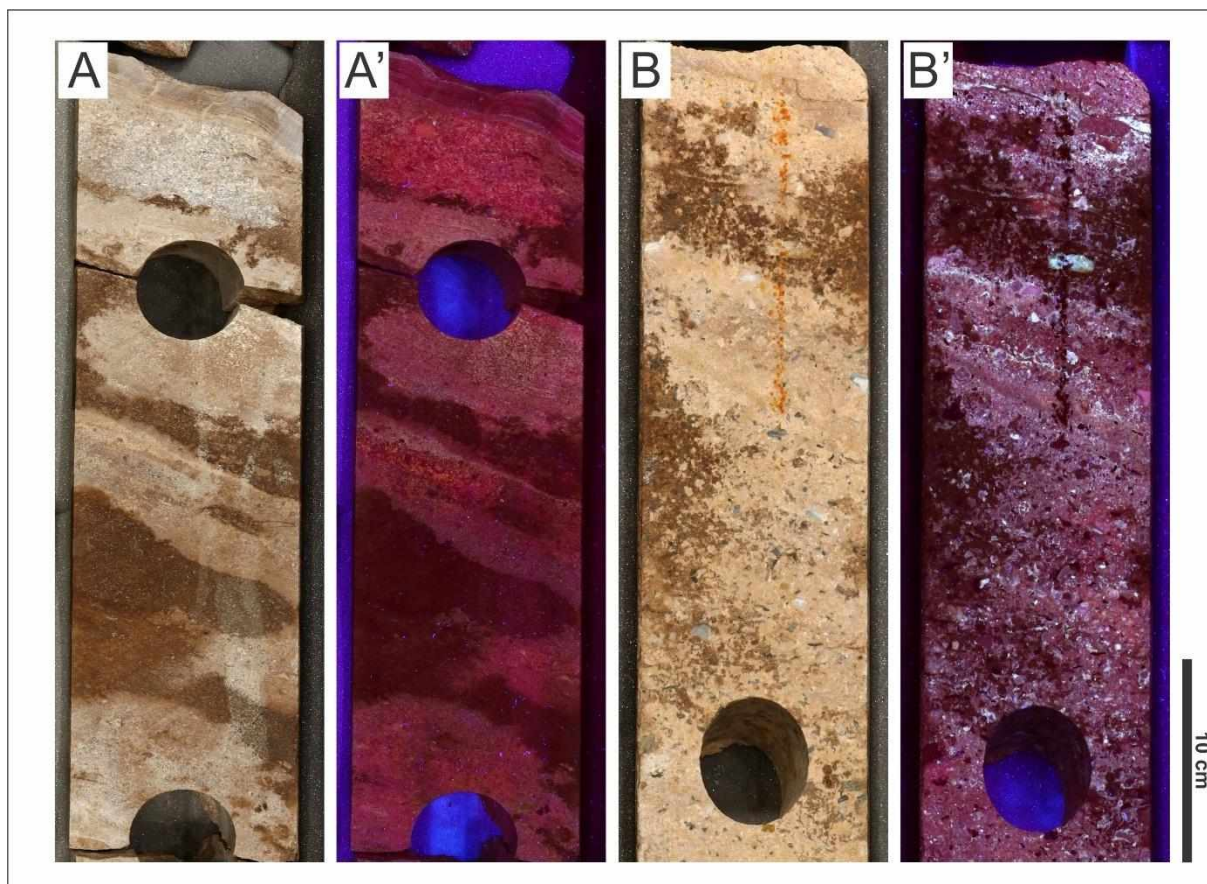
Fonte: A autora (2026).

Ainda sobre aspectos composicionais, no poço C foram identificados CRE ricos em bioclastos. Estes ocorrem concentrados nos intervalos de 4.929,75 a 4.929,95 m e de 4.930,1 a

4.930,22 m (Figura 10), apresentam aspecto maciço e são compostos, em sua maioria, por ostracodes articulados.

Alguns intervalos de CRE dos poços A, B e C apresentam dolomitização pervasiva, com presença de mosaicos de dolomita que preenchem poros e substituem constituintes calcícticos. Em certos níveis, a dolomitização é tão intensa que oblitera completamente as feições originais da rocha, permitindo sua classificação como dolomito. Em níveis onde a dolomitização não é tão intensa, observa-se, além de dolomita mosaico, a dolomita blocosa (Figura 22A) e romboédrica.

Figura 19: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço A. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços e intensamente dolomitizados. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B').



Fonte: A autora (2026).

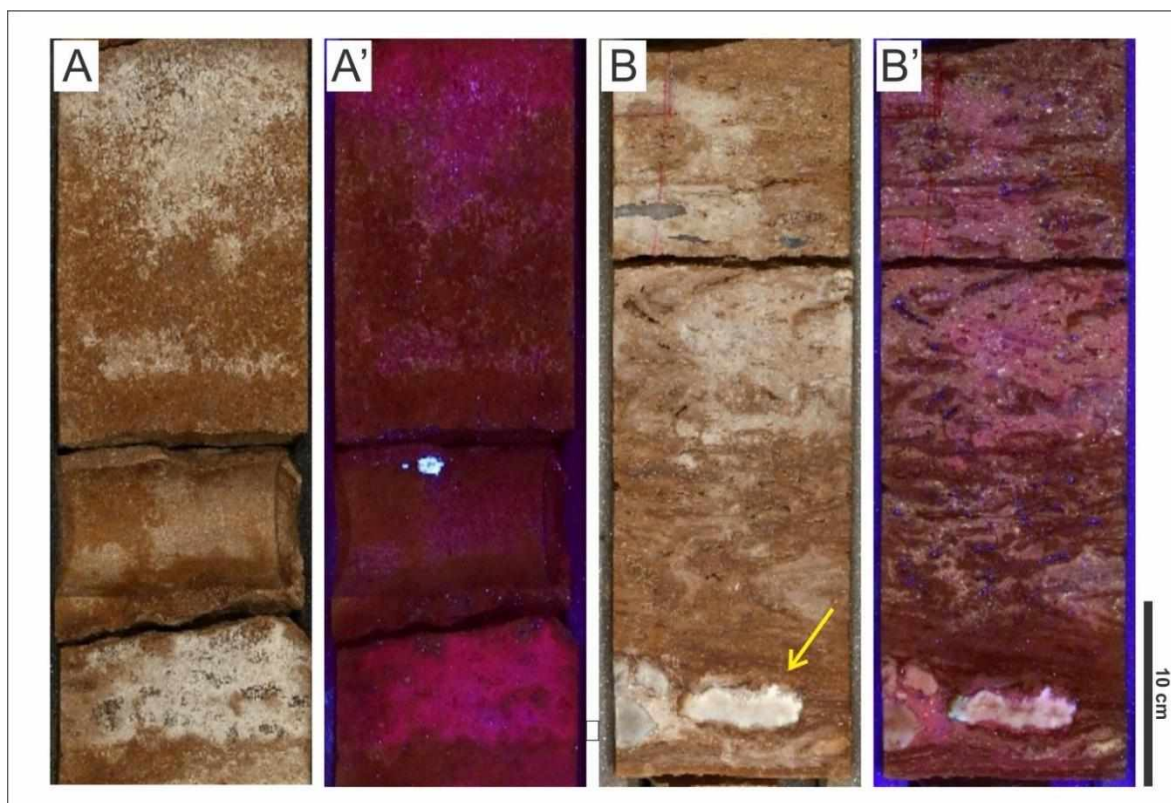
A silicificação também é comum nos CRE do Marco Lula, sendo ainda mais intensa nos poços A e B, o que possibilita a identificação macroscópica de sílica nodular e, em lâminas petrográficas, tem-se percentuais elevados de mosaicos de sílica macro- e microcristalina (Figura 22C). No poço C, a silicificação é menos intensa e concentrada em níveis específicos,

como, por exemplo, em 4.928,01 a 4.928,15, mas quando ocorre é semelhante à identificada nos demais poços.

5.1.2.2 Calcirruditos (CRU)

Os CRU (Figuras 20B, 21B e 22B) distinguem-se pela presença de clastos com dimensões superiores a 2 mm. No poço A, representam cerca de 15% da sucessão, ocorrendo em camadas com espessuras que variam entre 20 e 40 cm, mas que podem atingir até 1 m, principalmente quando presentes na porção basal do Marco Lula (Figura 8). No poço B, essa litologia também não apresenta grandes percentuais de ocorrência, correspondendo a aproximadamente 15% do intervalo e ocorrendo em camadas delgadas, com espessuras de até 40 cm, distribuídas ao longo de toda a sucessão (Figura 9). No poço C, os CRU mantêm a tendência de ocorrência subordinada, compondo, de modo similar aos demais poços, cerca de 15% do intervalo e ocorrendo em camadas pouco espessas, de até 40 cm, concentradas nas porções superiores do Marco Lula (Figura 10).

Figura 20: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço B. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços, dolomitizados e pontualmente observa-se nódulos de sílica (seta amarela). As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B').

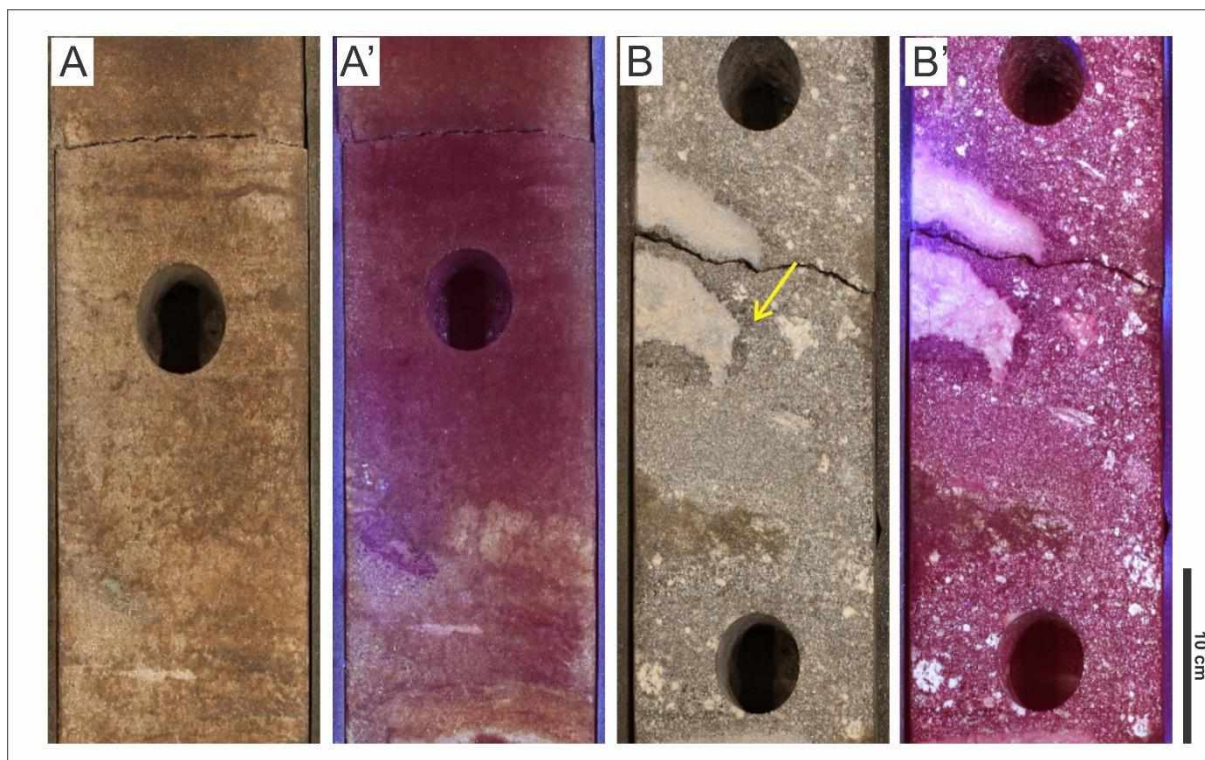


Fonte: A autora (2026).

Macroscopicamente os CRU apresentam-se maciços, mal a moderadamente selecionados, com clastos variando de angulosos a arredondados (Figuras 20B, 21B e 22B). As análises de lâminas petrográficas revelam uma composição muito semelhante à dos CRE, contudo, os CRU são constituídos preferencialmente por clastos carbonáticos indiferenciados (Figura 22). Fragmentos de rochas vulcânicas ocorrem de forma mais restrita e são mais recorrentes ao longo do poço A, assim como intraclastos de SPH e SHB. Observa-se que, quando sobrepostos às rochas formadas *in situ*, CRE e CRU formam contatos nítidos, geralmente erosivos, o que guarda relação com a presença dos intraclastos. Uma particularidade composicional dos CRU é a presença de clastos carbonáticos arredondados, similares a ooides (Figuras 23B e 23C).

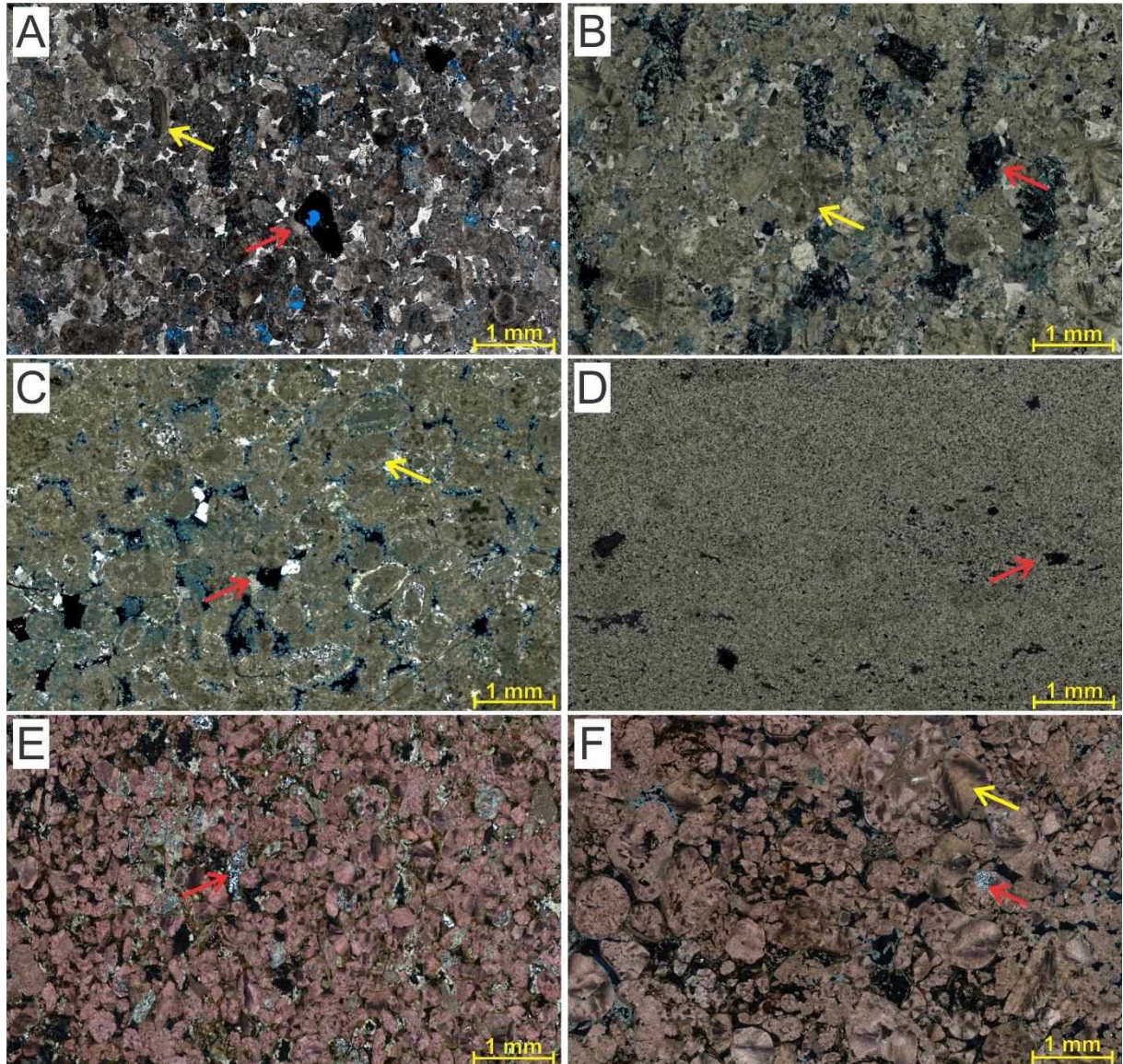
Com relação aos constituintes diagenéticos, tem-se ampla recorrência de dolomita mosaico e blocosa substituindo constituintes primários e preenchendo poros, estas são ainda mais abundantes no poço C, onde formam agregados (Figura 23E). A silicificação também é intensa, principalmente nos CRU dos poços A e B, onde sílica micro- e macrocristalina são frequentemente observadas preenchendo poros (*e.g.*, Figura 23A).

Figura 21: Principais aspectos macroscópicos das rochas retrabalhadas descritas ao longo do Marco Lula para o poço C. Em (A) CRE e (B) CRU, ambos maciços, dolomitizados e pontualmente observa-se nódulos de sílica. As imagens correspondentes sob luz ultravioleta (UV) são apresentadas em (A') e (B').



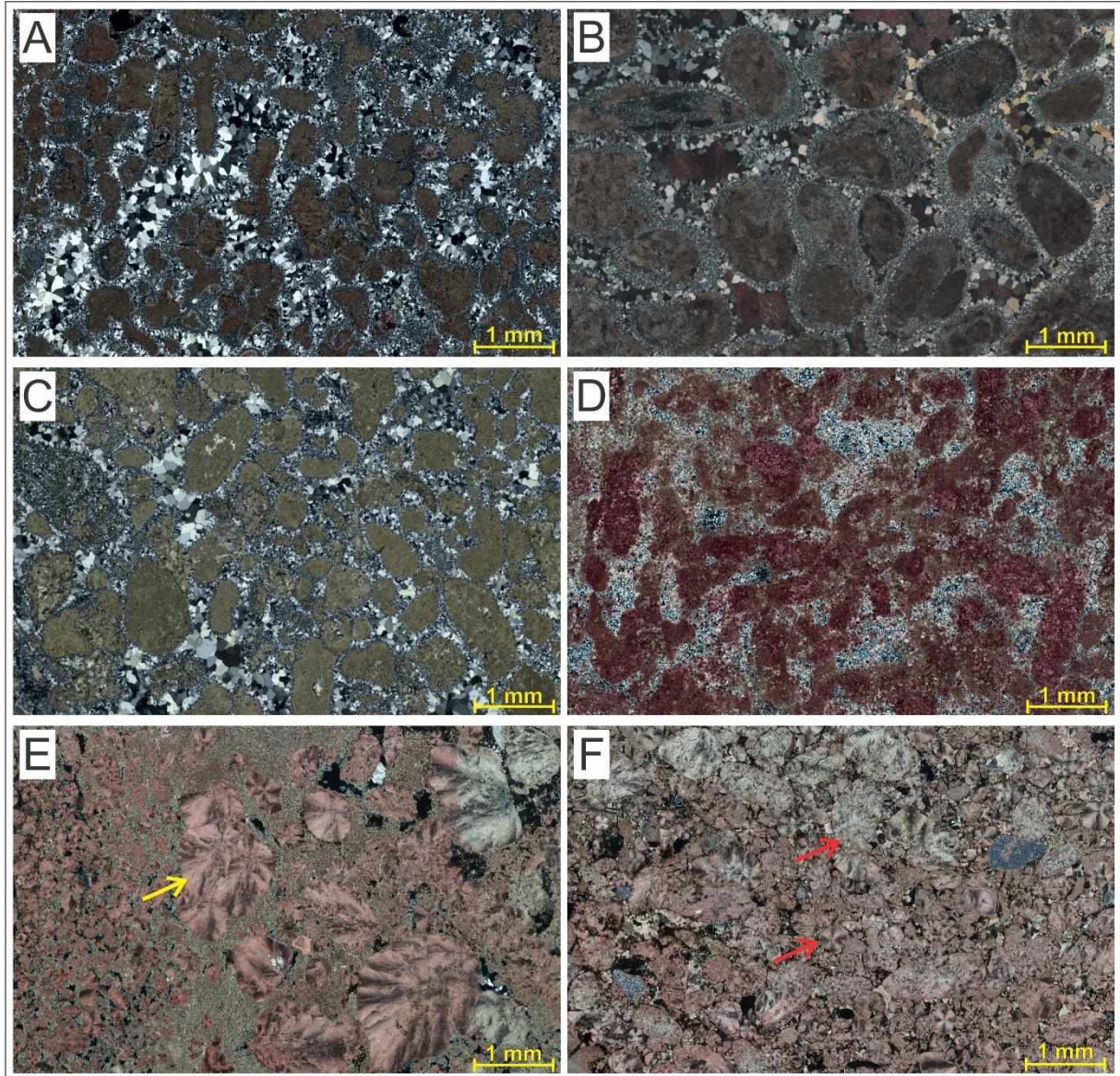
Fonte: A autora (2026).

Figura 22: Características microscópicas dos calcarenitos (CRE) do Marco Lula com intraclastos de *spherulestone* (SPH), *shrubstone* (SHB) e indiferenciados indicados pelas setas amarelas. Note a ampla recorrência de clastos carbonáticos indiferenciados (setas vermelhas), em (A) tem-se cimento de dolomita preenchendo poros; (B) destaque para a ocorrência de clastos vulcânicos (seta amarela), (C) CRE com sílica preenchendo parcialmente os poros, (D) Dolomito, (E e F) CRE calcítico com intraclastos.



Fonte: A autora (2026).

Figura 23: Características microscópicas dos calcirruditos (CRU) do Marco Lula. Note a ampla recorrência de clastos carbonáticos indiferenciados, com destaque em (A, B, C e D) para a presença de sílica macro- e microcristalina preenchendo poros, feições recorrentes nos poços A e B. Em (E e F) tem-se a presença de intraclastos de *spherulestone* (SPH) e *shrubstone* (SHB) como constituintes dos CRU indicados pelas setas amarela e vermelha, respectivamente.



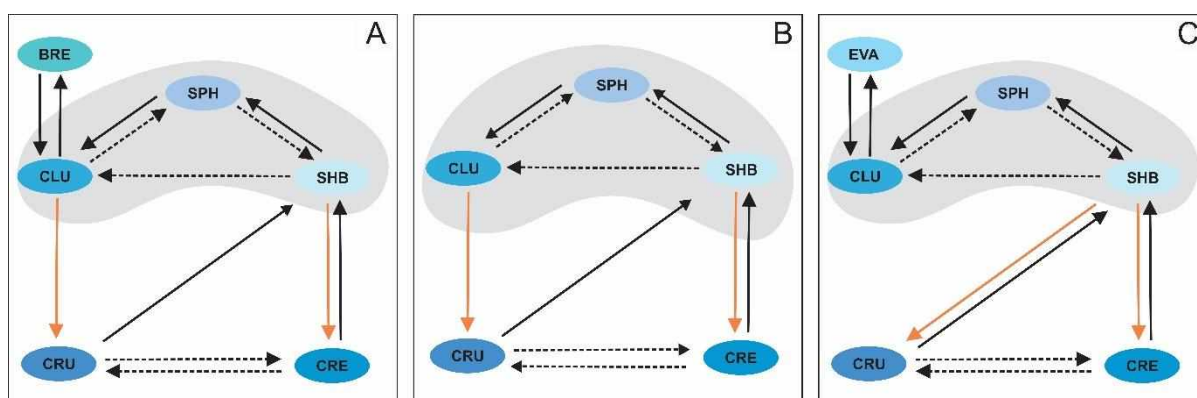
Fonte: A autora (2026).

5.1.3 Padrões litológicos do Marco Lula

Para aprimorar a compreensão das relações de contato entre as rochas que constituem o Marco Lula, foram empregadas, além das observações em testemunhos e lâminas petrográficas, análises de cadeias de Markov (Figura 24). Essa abordagem permitiu quantificar as probabilidades de transição vertical entre as litologias descritas, evidenciando padrões

recorrentes de associação e contribuindo para a caracterização do padrão litológico nos poços A, B e C.

Figura 24: Cadeias de Markov construídas com base nas principais litologias descritas para o Marco Lula nos poços A, B e C (A, B e C, respectivamente). O polígono cinza destaca a separação bem definida entre as rochas formadas *in situ* e as rochas retrabalhadas. As linhas tracejadas indicam as maiores probabilidades de transição vertical entre as litologias, enquanto a linha laranja marca a presença de rochas retrabalhadas sobre as rochas formadas *in situ*, indicando mudanças relevantes nas condições deposicionais. As abreviações correspondem a: CLU – calcilutito, SPH – *spherulestone*, SHB – *shrubstone*, CRE – calcarenito, CRU – calcirrudito, BRE – brecha e EVA – evaporito.



Fonte: A autora (2026).

De modo geral, os três poços apresentam padrões litológicos bastante similares (Figura 24). Observa-se forte recorrência entre as litologias formadas *in situ* (CLU, SPH e SHB), configurando um padrão cíclico no qual as maiores probabilidades de transição ocorrem de CLU para SPH e, subsequentemente, para SHB, conforme observado, por exemplo, entre 5.034 e 5.036 m de profundidade do poço A (Figura 8). As análises macro- e microscópicas demonstram que a transição entre essas litologias ocorre de forma gradacional, resultando em uma interação recorrente entre matriz argilosa, esferulitos e *shrubs*.

As cadeias também indicam que SHB pode transicionar verticalmente para CLU, o que normalmente forma um contato irregular, no qual o topo côncavo dos *shrubs* é recoberto por argilominerais. Todavia, a probabilidade de SHB ser sucedido por CRE também é significativa. Neste cenário, o contato é abrupto, frequentemente erosivo, sugerindo mudanças bruscas nas condições deposicionais. Nos poços A e B (Figuras 24A e B), essas mudanças também se expressam pela ocorrência de CRU sobrepondo-se de modo discordante aos CLU.

Assim como observado para as litologias formadas *in situ*, as retrabalhadas também apresentam, em todos os poços estudados, uma relação autoconsistente (Figura 24), o que pode ser observado em intervalos como 5.054 e 5.056 m do poço A (Figura 8). Embora o contato

entre CRE e CRU nem sempre seja nítido, observando-se por vezes variações graduais na proporção dos grãos maiores e menores que 2 mm, a recorrência estatística dessas transições é significativa ao longo dos três poços (Figuras 8, 9 e 10). De acordo com a Figura 24, as rochas retrabalhadas são sucedidas, preferencialmente por SHB, sendo esta a litologia *in situ* que apresenta maior conectividade com os depósitos retrabalhados.

Associações adicionais incluem a relação entre CLU e brechas (BRE) ao longo do poço A (Figura 24A), reforçando a interpretação de que se trata de uma brecha intraformacional. Além disso, no topo do Marco Lula recuperado do poço C, tem-se a relação entre CLU e níveis evaporíticos, igualmente evidenciada na matriz de transição vertical (Figura 24C).

Apesar das similaridades probabilísticas para as transições litológicas (Figura 24), o padrão de empilhamento e a distribuição estratigráfica dessas litologias apresentam características bastante particulares, especialmente quando se compara os poços A e B com o poço C.

Na base dos poços A e B (5051,20 – 5056 m e 4857,50 – 4875,00 m, respectivamente; Figuras 8 e 9) percebe-se um predomínio de CRE e CRU, organizados preferencialmente em padrões *coarsening-up*, melhor desenvolvidos no poço B. As rochas formadas *in situ*, minoritárias na porção basal dos poços A e B, ganham destaque em suas porções intermediárias (5046,70 – 5051,20 m e 4862,00 – 4973,10 m, respectivamente; Figuras 9 e 10), com especial recorrência de CLU com laminações irregulares a crenuladas, que atingem grandes espessuras no poço A, enquanto no poço B são restritos a um único pacote de CLU. Já o topo do Marco Lula nos poços A e B (5032,00 – 5035,50 m e 4845,00 – 4853,70 m, respectivamente; Figuras 8 e 9) é caracterizado pela transição entre SPH e SHB, cujas relações são melhor estabelecidas e desenvolvidas no poço B.

O poço C, localizado um pouco mais afastado dos demais (Figura 1), é o que apresenta as maiores particularidades litológicas (*e.g.*, camadas delgadas de evaporitos, CRE ricos em bioclastos e CLU esverdeados) e estratigráficas. No geral, tem-se um intervalo basal (4928,00 – 4937,50 m; Figura 10) constituído essencialmente por rochas formadas *in situ*, no qual ocorrem também os CRE ricos em bioclastos. No segundo padrão de empilhamento observado no poço C (4919,60 – 4928,00 m; Figura 10) é notável a recorrência de rochas retrabalhadas, com destaque para os CRU. Em direção ao topo (4916,00 – 4928,00 m; Figura 10), destaca-se a presença de CLU com laminações irregulares a crenuladas.

Assim, embora as cadeias de Markov indiquem padrões semelhantes de associação vertical entre os poços A, B e C (Figura 24), as diferenças no empilhamento e na espessura dos

pacotes sugerem variações locais nas condições deposicionais e na dinâmica de retrabalhamento ao longo do Marco Lula.

5.2 Caracterização química do Marco Lula

5.2.1 Fácies químicas definidas por análise multivariada de agrupamento

O analisador de FRX-p retornou, para as três sucessões analisadas (poços A, B e C), uma base de dados brutos em que cada medida conta com 39 elementos químicos, a saber: Mg, Al, Si, P, S, K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Ag, Cd, Sn, Sb, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Ta, W, Hg, Pb, Th e U, além do LE. Na fase de pré-processamento, esse quantitativo foi reduzido para 11 elementos, Ca, Mg, Si, Al, K, Fe, Mn, Ba, P, S e Sr, mais o LE, comuns aos intervalos analisados dos poços A, B e C.

A análise da estatística descritiva (Tabelas 1, 2 e 3) revela que alguns desses elementos apresentam distribuições assimétricas, com valores elevados de desvio padrão e variância, indicando dispersão significativa no conjunto de dados.

Tabela 1: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço A.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	30,29	0,34	19,98	21,73	7,27	52,86
Mg	9,51	0,17	4,42	4,14	2,01	4,05
Si	41,86	0,69	9,38	5,46	9,80	96,00
Al	0,98	0,00	0,25	0,21	0,17	0,03
K	0,25	0,00	0,05	0,03	0,05	0,00
Fe	0,43	0,00	0,12	0,09	0,09	0,01
Mn	0,19	0,00	0,06	0,06	0,05	0,00
Ba	0,82	0,00	0,14	0,11	0,11	0,01
P	0,10	0,00	0,02	0,02	0,02	0,00
S	4,54	0,11	0,54	0,41	0,51	0,26
Sr	0,64	0,01	0,19	0,19	0,09	0,01
LE	74,43	55,75	64,79	64,38	3,94	15,54

Fonte: A autora (2026).

Tabela 2: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço B.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	32,94	0,31	16,52	16,05	6,23	38,85
Mg	12,35	0,37	5,89	5,90	2,74	7,53
Si	42,83	0,86	9,48	6,10	8,86	78,49
Al	4,86	0,00	0,40	0,26	0,55	0,31
K	0,78	0,00	0,10	0,07	0,11	0,01
Fe	0,72	0,00	0,14	0,12	0,10	0,01
Mn	0,14	0,00	0,05	0,06	0,04	0,00
Ba	1,10	0,00	0,16	0,10	0,19	0,03
P	0,16	0,00	0,03	0,02	0,03	0,00
S	1,83	0,00	0,48	0,38	0,33	0,11
Sr	0,26	0,00	0,10	0,10	0,07	0,01
LE	81,04	54,17	66,34	65,83	5,33	28,40

Fonte: A autora (2026).

Tabela 3: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço C.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	30,37	1,81	22,39	24,87	6,56	43,02
Mg	9,36	0,00	3,59	3,21	2,07	4,29
Si	36,81	0,57	6,23	4,11	6,44	41,43
Al	2,77	0,00	0,37	0,24	0,46	0,22
K	2,52	0,00	0,15	0,02	0,46	0,21
Fe	2,41	0,00	0,22	0,09	0,49	0,24
Mn	0,12	0,00	0,07	0,09	0,04	0,00
Ba	1,04	0,01	0,08	0,03	0,16	0,03
P	0,46	0,00	0,03	0,02	0,06	0,00
S	10,38	0,00	0,78	0,38	1,66	2,74
Sr	0,86	0,00	0,18	0,17	0,12	0,01
LE	84,40	59,13	65,76	64,70	4,39	19,27

Fonte: A autora (2026).

Conforme observado nas Tabelas 1, 2 e 3, o Si constitui o elemento com maior dispersão nos três poços, apresentando ampla amplitude entre valores mínimos e máximos, desvio padrão expressivo e médias superiores às medianas, o que caracteriza uma distribuição assimétrica positiva. O Ca e o LE exibem, para os três poços, comportamentos semelhantes ao do Si, com ampla amplitude entre mínimos e máximos e alta dispersão. Contudo, nos poços A e C, a média do Ca é inferior à mediana, sugerindo assimetria negativa, enquanto no poço B os valores de média e mediana são próximos, indicando distribuição relativamente simétrica.

Outros elementos que também chamam atenção por apresentarem distribuição assimétrica em todos os poços são o S e Fe, ambos com médias superiores às medianas,

caracterizando uma distribuição assimétrica positiva. Essa assimetria é mais expressiva no poço C, onde a amplitude dos dados e o desvio padrão são mais elevados.

Em contraste, elementos como Mg, Al, Mn, P e Sr apresentam amplitude não muito elevada, o que é consistente com os desvios padrão calculados. Ademais, as médias são normalmente próximas às medianas, indicando uma distribuição relativamente simétrica nos três poços.

Para reduzir o efeito da assimetria e da alta variabilidade na análise multivariada de agrupamento, os dados foram redimensionados para um intervalo fixo entre 0 e 1 (normalização). Esse procedimento torna a base de dados mais regular, conforme se observa nas Tabelas 4, 5 e 6, e, com isso melhora o desempenho e a convergência de métodos baseados em distância, como o SOM e o *k-Means*.

Tabela 4: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço A.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	1,00	0,00	0,64	0,71	0,24	0,06
Mg	1,00	0,00	0,46	0,43	0,22	0,05
Si	1,00	0,00	0,22	0,12	0,24	0,06
Al	1,00	0,00	0,26	0,21	0,17	0,03
K	1,00	0,00	0,18	0,12	0,21	0,04
Fe	1,00	0,00	0,28	0,20	0,21	0,04
Mn	1,00	0,00	0,29	0,31	0,26	0,07
Ba	1,00	0,00	0,16	0,13	0,10	0,01
P	1,00	0,00	0,21	0,18	0,16	0,03
S	1,00	0,00	0,10	0,08	0,12	0,01
Sr	1,00	0,00	0,27	0,29	0,12	0,01
LE	1,00	0,00	0,49	0,47	0,22	0,05

Fonte: A autora (2026).

Tabela 5: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço B.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	1,00	0,00	0,44	0,43	0,17	0,03
Mg	1,00	0,00	0,47	0,48	0,22	0,05
Si	1,00	0,00	0,22	0,14	0,21	0,04
Al	1,00	0,00	0,08	0,05	0,11	0,01
K	1,00	0,00	0,09	0,06	0,10	0,01
Fe	1,00	0,00	0,09	0,08	0,06	0,00
Mn	1,00	0,00	0,32	0,36	0,25	0,06
Ba	1,00	0,00	0,14	0,09	0,17	0,03
P	1,00	0,00	0,07	0,06	0,07	0,01
S	1,00	0,00	0,09	0,07	0,06	0,00
Sr	1,00	0,00	0,25	0,25	0,19	0,03
LE	1,00	0,00	0,46	0,44	0,20	0,04

Fonte: A autora (2026).

Tabela 6: Estatística descritiva dos dados químicos obtidos por análises de FRX-p e normalizados [0; 1] para o intervalo correspondente ao Marco Lula no poço C.

Elementos químicos	Máximo (%)	Mínimo (%)	Média (%)	Mediana (%)	Desvio Padrão	Variância
Ca	1,00	0,00	0,68	0,76	0,22	0,05
Mg	1,00	0,00	0,38	0,34	0,22	0,05
Si	1,00	0,00	0,16	0,10	0,18	0,03
Al	1,00	0,00	0,14	0,09	0,17	0,03
K	1,00	0,00	0,06	0,01	0,18	0,03
Fe	1,00	0,00	0,09	0,03	0,21	0,04
Mn	1,00	0,00	0,58	0,69	0,28	0,08
Ba	1,00	0,00	0,07	0,02	0,16	0,02
P	1,00	0,00	0,07	0,04	0,13	0,02
S	1,00	0,00	0,07	0,03	0,16	0,03
Sr	1,00	0,00	0,21	0,19	0,14	0,02
LE	1,00	0,00	0,26	0,22	0,17	0,03

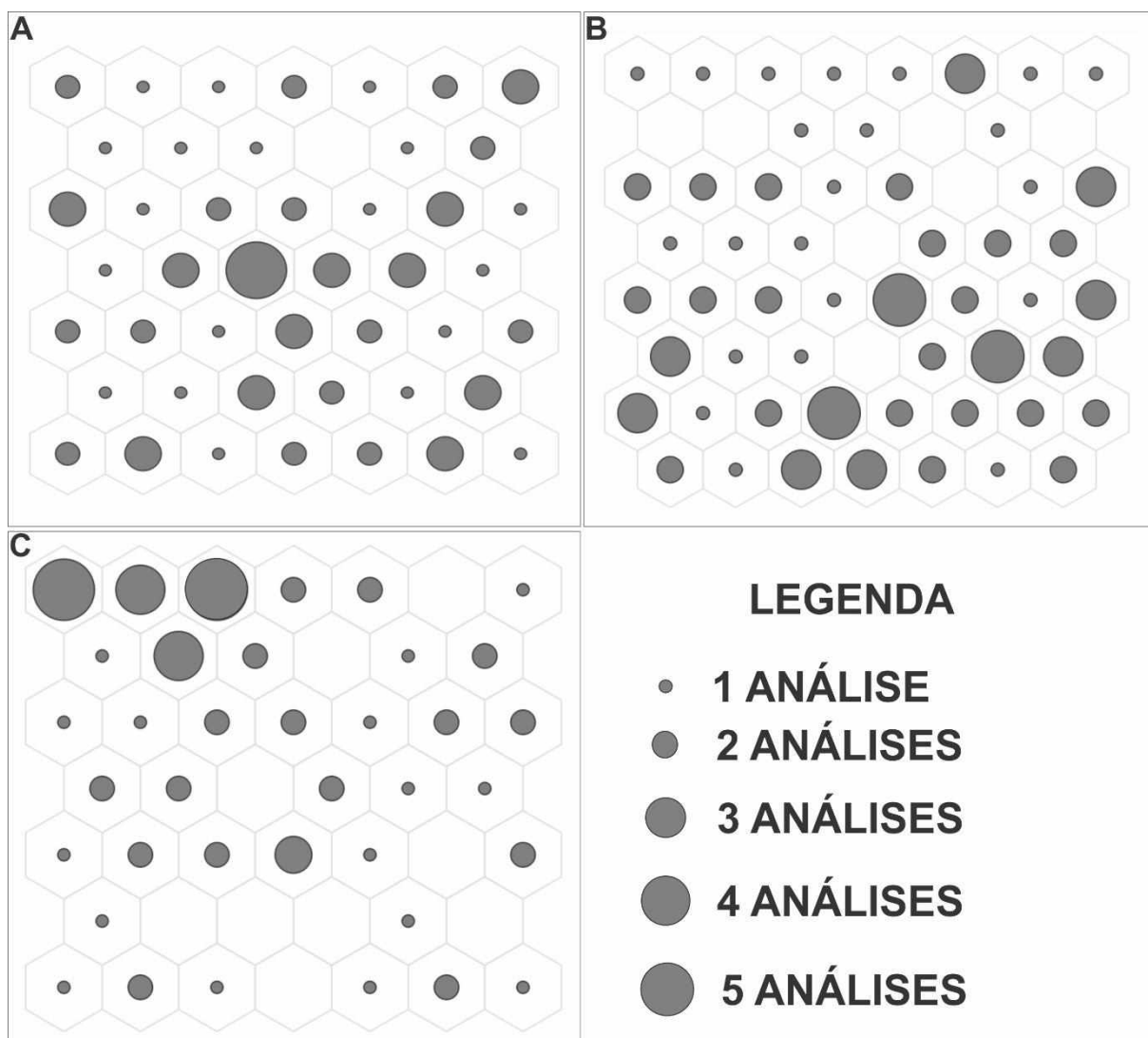
Fonte: A autora (2026).

Uma outra característica do *k-Means* é sua tendência de apresentar melhor desempenho em conjuntos de dados com menor número de variáveis. Para atender a essa prerrogativa, sem, contudo, ter uma perda significativa da informação, empregou-se, conforme o fluxo de trabalho apresentado na Figura 2, o SOM. Este algoritmo organiza os dados por similaridade e, para as sucessões dos poços A e C, retornou uma malha hexagonal 7x7 e, para o poço B, uma malha 8x8 (Figura 24) que descreve as relações espaciais, de vizinhança e a conectividade entre as análises realizadas, que se similares são posicionadas na mesma posição da malha.

Dessa forma, as 12 variáveis foram compiladas em apenas três. Agora, cada análise realizada passa a ser representada não por 12 elementos químicos, mas pela posição que ocupa na malha, por meio do número representativo da coluna e da linha (Figura 25) e, também, pelo erro da análise do SOM. Conforme a Figura 2, com essa nova base de dados procedeu-se com o agrupamento por *k-Means*, cujo número de grupos foi escolhido manualmente com base nos valores de *silhouette score*.

No Marco Lula do poço A, os valores médios de *silhouette score* variaram entre 0,37 e 0,39 para até quatro *clusters*, aumentando para 0,407, 0,421 e 0,416 nas soluções com cinco, seis e sete agrupamentos, respectivamente. Diante da proximidade entre esses valores mais elevados, optou-se pela solução mais compacta entre elas, adotando cinco clusters (A1–A5) para sintetizar as variações composicionais do intervalo de estudo (Tabela 7).

Figura 25: Mapas auto-organizáveis (*Self-Organizing Maps* – SOM) empregados na redução da dimensionalidade da base de dados para (A) dados sintetizados do Marco Lula no poço A; (B) poço B; e (C) poço C. Cada célula da malha hexagonal representa um neurônio do mapa, onde são associadas amostras com características composicionais semelhantes. O diâmetro dos círculos é proporcional ao número de análises que compartilham a mesma posição na malha, conforme indicado na legenda.



Fonte: A autora (2026).

No poço B, os melhores desempenhos ocorreram com quatro, seis e sete *clusters* (0,411, 0,409 e 0,415, respectivamente). Mantendo o critério de equilíbrio entre qualidade de separação e simplicidade do modelo, selecionou-se a divisão em quatro *clusters* (B1–B4; Tabela 8), o que pode ser um primeiro indicativo de maior homogeneidade composicional ao longo dessa sucessão. Para o poço C, o padrão foi semelhante ao do poço A, com maiores valores para cinco, seis e sete *clusters* (0,425, 0,411 e 0,432, respectivamente). Assim, novamente se privilegiou a solução mais compacta entre as de melhor desempenho, resultando em cinco *clusters* (C1–C5; Tabela 9).

Tabela 7: *Clusters* representativos do Marco Lula no poço A. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os *clusters* e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.

<i>Cluster</i>	Percentual de ocorrência	Elementos químicos diagnósticos
A1	28%	Ca, Mg
A2	15%	Si
A3	19%	Fe, Al, K, Mg
A4	18%	Ca, Mg, Sr, LE
A5	20%	Fe, Al, K, Mn, Ba

Fonte: A autora (2026).

Tabela 8: *Clusters* representativos do Marco Lula no poço B. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os *clusters* e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.

<i>Cluster</i>	Percentual de ocorrência	Elementos químicos diagnósticos
B1	49%	Ca, Mg
B2	25%	Si
B3	7%	Fe, Al, K, Ba
B4	19%	Fe, Al, K, S

Fonte: A autora (2026).

Tabela 9: *Clusters* representativos do Marco Lula no poço C. Destaca-se seu percentual de ocorrência e elementos diagnósticos, ou seja, aqueles que possuem maior afinidade com os *clusters* e, normalmente, estão presente em percentuais mais elevados.

<i>Cluster</i>	Percentual de ocorrência	Elementos químicos diagnósticos
C1	39%	Ca, Mg
C2	23%	Ca, Sr, Ba, LE
C3	25%	Fe, Al, K, Mn, S
C4	10%	Si
C5	3%	Si, Ba, LE

Fonte: A autora (2026).

A influência dos elementos químicos em cada *cluster* pode ser observada diretamente em gráficos de projeção linear, graças a afinidade do grupo de amostras com o vetor representativo de cada elemento químico (Figuras 26A, 27A e 28A). Além disso, com base no ângulo entre os vetores projetados, é feita a interpretação da afinidade entre os elementos químicos quantificados ao longo da sucessão analisada. Sabe-se que quanto menor o ângulo, maior a correlação positiva; ângulos próximos de 90° indicam ausência de correlação; já ângulos próximos de 180°, correlação negativa.

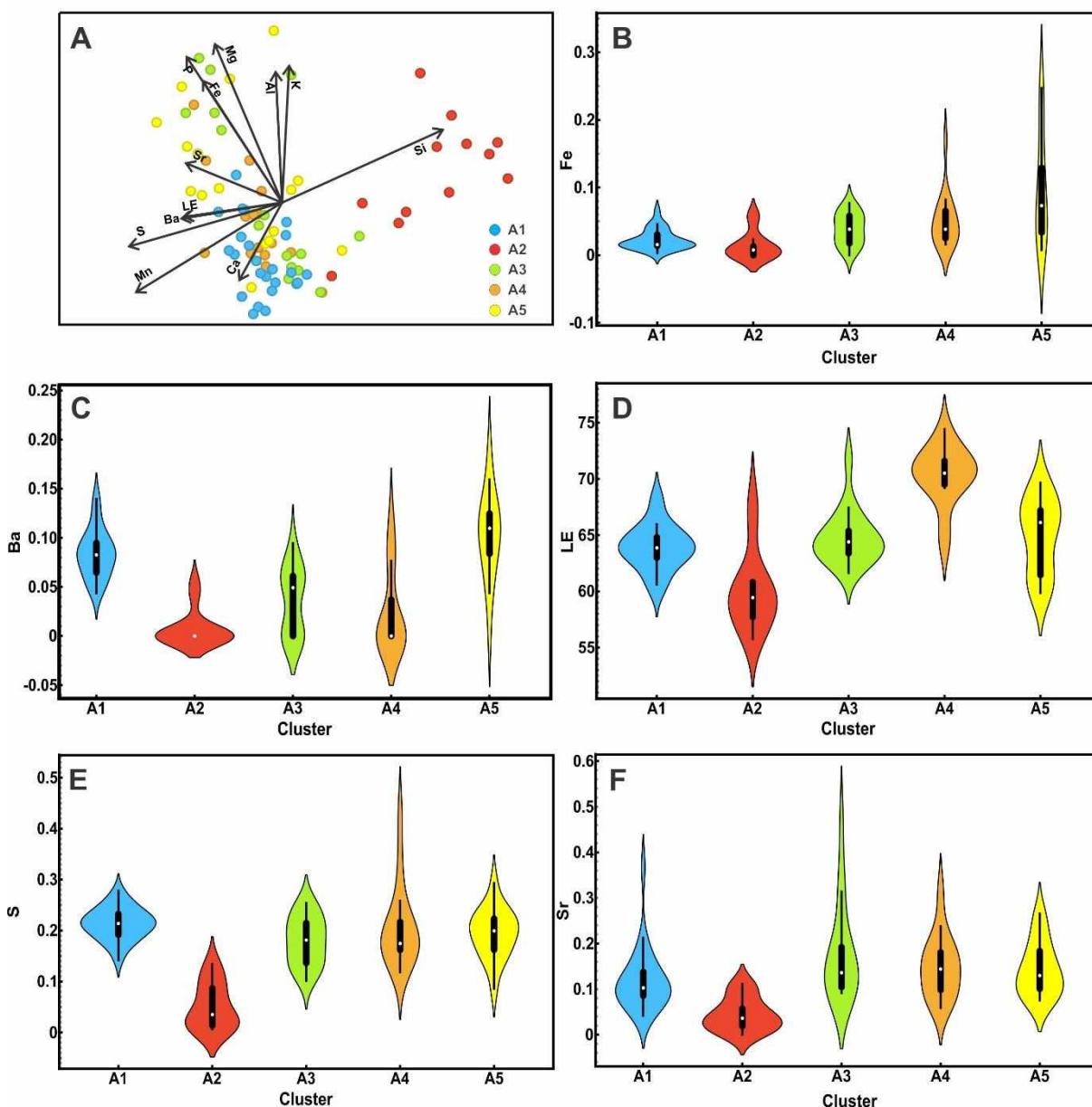
Conforme observado nas Figuras 26A, 27A e 28A algumas tendências geoquímicas são recorrentes nas três sucessões analisadas. Destaca-se a relação inversa entre Si e Ca, evidenciada pela orientação aproximadamente oposta de seus vetores no gráfico de projeção linear. Os vetores de Fe, Al e K apresentam-se consistentemente próximos entre si, formando ângulos baixos, o que sugere forte correlação positiva e possível controle mineralógico comum. No poço C (Figura 28A), P e S demonstram afinidade com esse grupo, indicando associação geoquímica compatível.

Observa-se ainda similaridade na disposição dos vetores de Ba, Mn, LE, Sr, Ca e Mg, indicando correlação positiva e possível interação nos mesmos processos geoquímicos ou mineralógicos. Neste conjunto de elementos e a depender do poço analisado, as maiores desassociações angulares são registradas nos vetores de Mg, Ba e LE (Figuras 26A, 27A e 28A), indicando que esses possuem comportamentos geoquímicos mais independentes.

Tratando especificamente da interpretação dos clusters do poço A, observa-se a partir do gráfico de projeção linear (Figura 26A) uma sobreposição significativa entre os *clusters*, principalmente os influenciados por Ca, Mg e Fe. O Ca e Mg mostram-se abundante e relativamente homogêneo em quase todos os *clusters*, com exceção de A2, contribuindo diretamente para a sobreposição observada e tornando necessária a análise dos gráficos complementares, como os *violin plots* (Figuras 26B – 26F), que, nestes casos, permitem uma discriminação geoquímica mais refinada.

Dessa forma, é possível associar o *cluster* A1, o mais recorrente e, portanto, o mais representativo do intervalo de estudo (Tabela 7), as maiores concentrações de Ca e Mg. O *cluster* A2, que corresponde a aproximadamente 15% do intervalo analisado, distingue-se pelo aumento significativo do teor de Si e pela diminuição relativa dos demais elementos, incluindo Ca e Mg. Os *clusters* A3 e A5 apresentam recorrência de Fe, Al, K, P e S, ainda que em baixos percentuais. Contudo, no *cluster* A5, esses elementos ocorrem em concentrações relativamente mais elevadas quando comparadas às de A3, como representado nas Figuras 26B e E. Além disso, em A3 tem-se maior afinidade com Mg, enquanto A5 é mais associado à presença de Mn e Ba (Figura 25A e C). Por fim, o *cluster* A4 apresenta composição semelhante à de A1, diferenciando-se pela presença mais expressiva de LE, mas também pela maior afinidade com Sr, Fe, Al e K (Figuras 26A, B, D e F).

Figura 26: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço A. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço A (A1, A2, A3, A4 e A5) de acordo com as concentrações de (B) Fe, (C) Ba, (D) LE, (E) S e (F) Sr, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados.



Fonte: A autora (2026).

No Marco Lula do poço B, observa-se, a partir do gráfico de projeção linear (Figura 27A) que as maiores sobreposições ocorrem entre os *clusters* controlados por Fe, Al e K, tornando essencial a análise de gráficos complementares, como os das Figuras 27B – 27F, para a interpretação química de clusters como B3 e B4. A análise dos dados mostra que B1 e

B2, grupos de maior recorrência apresentam distribuições homogêneas e facilmente identificáveis. B1, *cluster* mais abundante do intervalo (Tabela 8), concentra os maiores percentuais de Ca e Mg, além de apresentar Sr e Mn de forma subordinada. B2 é o segundo *cluster* mais abundante, estando associado as maiores concentrações de Si e correlação negativa com praticamente todos os demais elementos.

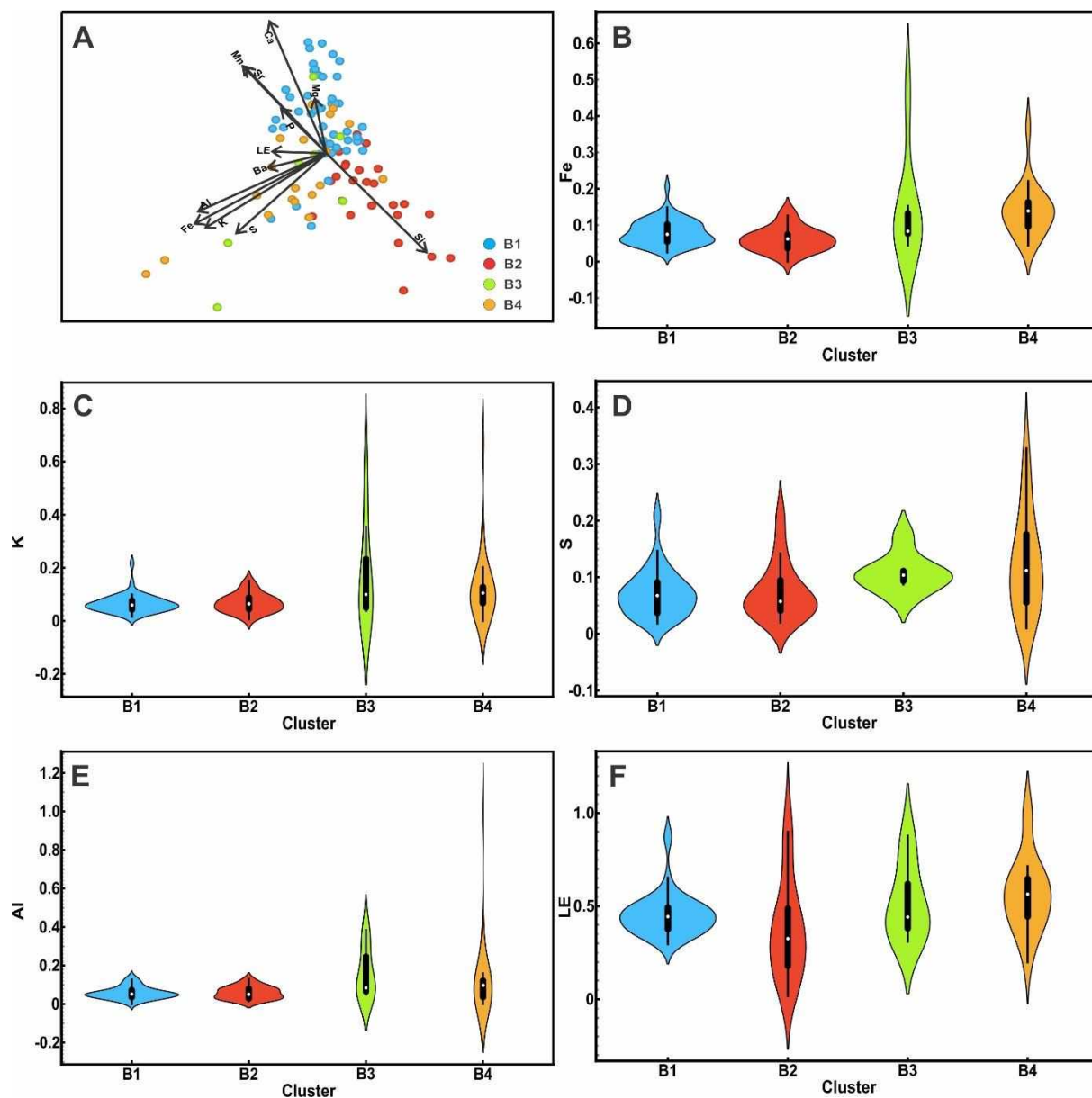
B3 e B4, em conjunto, somam cerca de 26% da ocorrência dos *clusters*, sendo B3 muito restrito no intervalo analisado (Tabela 8). São caracterizados pela afinidade com Fe, Al e K (Figura 27A) e diferenciam-se principalmente pela ocorrência de valores aumentados de Ca e Ba em B3 e pela concentração mais elevada de S em B4. Ademais, os gráficos de *violin plots* mostram que apesar das médias similares, Fe e K possuem ampla distribuição no *cluster* B3 (Figura 27B e C). Por outro lado, a distribuição de S e Al é maior em B4 (Figura 27D e E), padrão que também pode ser usado para distinguir esses dois grupos. Destaca-se, ainda, que alguns exemplares de B4 e, especialmente, de B3 apresentam afinidade com Mg e LE, conforme sugere a dispersão de pontos da Figura 27A. Diferentemente do poço A, LE não é diagnóstico na caracterização dos *clusters* do poço B, apresentando valores médios muito similares, especialmente em B1, B3 e B4 (Figura 27F).

O gráfico de projeção linear do poço C (Figura 28A) possui uma particularidade em relação aos demais. Para este poço, Ba e LE apresentam vetores paralelos ao Si, sugerindo uma correlação forte e positiva entre esses elementos. Com isso, observa-se sobreposições de *clusters* tanto nos grupos mais influenciados por Ca, Mg e Sr quanto naqueles marcados pela presença de Si, assinatura química que nos poços A e B, não apresentou qualquer tipo de sobreposição, sendo facilmente distinguida das demais (Figuras 26A, 27A e 28A).

À semelhança dos poços A e B, o *cluster* C1 do poço C é o mais abundante e caracterizado pelos maiores teores de Ca e Mg, que definem sua assinatura composicional dominante (Tabela 9). O *cluster* C2 constitui o segundo grupo mais frequente e, além do Ca, é fortemente influenciado pela ocorrência de Sr, Ba e LE e, de modo mais restrito, Mn. Já C3 é caracterizado por Fe, Al, K, Mn e S, elementos que, embora presentes em baixos percentuais absolutos, mostram-se recorrentes no Marco Lula.

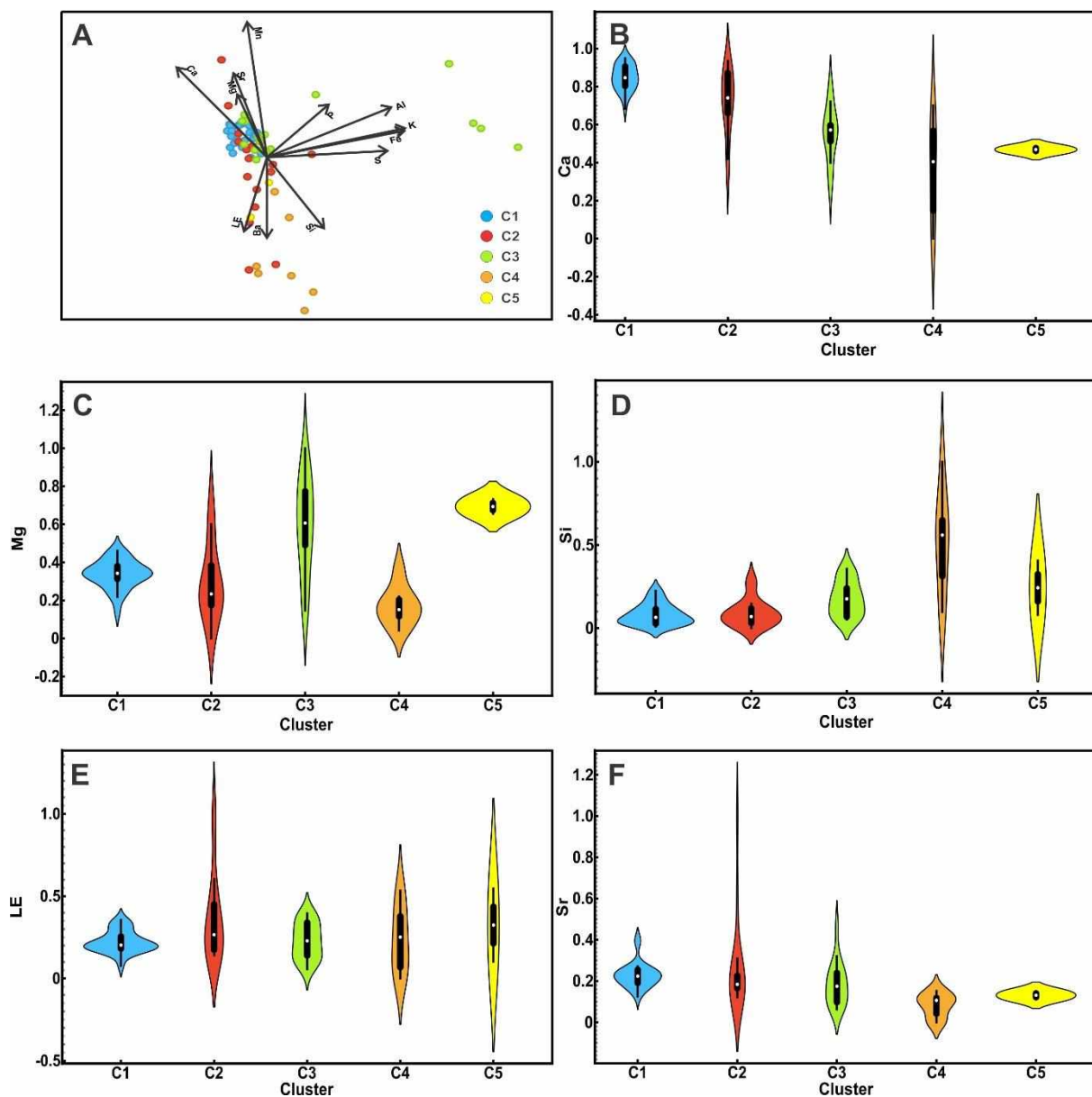
O gráfico de projeção linear (Figura 28A) evidencia sobreposição entre amostras dos *clusters* C1 e C3, o que pode ser explicado pelas concentrações relativamente homogêneas de Ca, Mg e Sr ao longo do intervalo de estudo. Além disso, observa-se também uma proximidade composicional entre os *clusters* C1 e C2.

Figura 27: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço B. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço B (B1, B2, B3 e B4) de acordo com as concentrações de (B) Fe, (C) K, (D) S, (E) Al e (F) LE, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados.



Fonte: A autora (2026).

Figura 28: (A) Gráfico de projeção linear evidenciando a relação entre os *clusters* e os respectivos elementos químicos ao longo do Marco Lula recuperado do poço C. (B, C, D, E e F) Gráficos do tipo *violin plot*, com a representação do *box plot*, ilustrando a distribuição, densidade, dispersão e tendência central dos *clusters* definidos ao longo do Marco Lula no poço C (C1, C2, C3, C4 e C5) de acordo com as concentrações de (B) Ca, (C) Mg, (D) Si, (E) LE e (F) Sr, elementos diagnósticos na distinção dos *clusters*, mas que se apresentam parcialmente sobrepostos no gráfico de projeção linear. Note que o ponto branco no interior do *box plot* representa a média dos dados.



Fonte: A autora (2026).

Neste caso, faz-se uso de gráficos de *violin plot* (Figuras 28B – 28C), que mostram que, apesar da sobreposição, as amostras de C3 apresentam teores relativamente mais elevados de Mg e menores de Ca, quando comparadas com C1 (Figuras 28B e C). Já as amostras de C2,

mesmo quando plotadas próximas de C1, mantêm a característica de exibir maiores concentrações de LE e Sr (Figuras 28E e F). Essa proximidade entre C1 e C2 (Figura 28A) ocorre pontualmente devido a uma maior influência de Mg no *cluster* C2.

Em C4 e C5, *clusters* de ocorrência mais restrita (Tabela 9), verifica-se uma afinidade com Si e, por isso, também há grande sobreposição entre esses conjuntos de dados (Figura 28A). C4 distingue-se pelos maiores teores de Si, com contribuição subordinada de Ba, enquanto C5 representa o agrupamento com menor percentual de ocorrência, sendo dominado por Si, Ba e LE.

A recorrência de Ba e LE como constituintes relevantes para a caracterização dos *clusters* é característico do poço C e, como consequência observa-se, também, uma sobreposição entre exemplares de C2, C4 e C5 (Figura 28A). Novamente, faz-se uso dos gráficos das Figuras 28D – 28E, onde se percebe que a distinção entre eles decorre das afinidades com Ca (maior em C2) ou com Si (maior em C4 e C5), destacando que as concentrações mais elevadas de LE ocorrem em C2 e as distribuição mais restrita de LE em C4 (Figura 28E), conferindo identidade geoquímica própria a cada *cluster*.

Além do significado químico, vale destacar que no Marco Lula no poço A, apesar de A1 ser mais recorrente, todos os *clusters* tem percentuais de ocorrência elevados, sendo A2 o mais restrito deles (Tabela 7). Tal padrão não é observado nos poços B e C, onde *clusters* como B3, C4 e C5 ocorrem em percentuais muito baixos (Tabelas 8 e 9), marcando particularidades composicionais localizadas e os demais *clusters*, dominantes, sugerem maior homogeneidade da sucessão.

Apesar das particularidades observadas em cada poço, verificam-se ao longo do Marco Lula dos poços A, B e C tendências de associação entre os elementos químicos bem definidas (Tabelas 7, 8 e 9; Figuras 26, 27 e 28). Esses padrões são recorrentes e passíveis de reconhecimento e correlação entre os diferentes poços, evidenciando consistência composicional ao longo da área estudada.

Tal recorrência permite a identificação de arranjos geoquímicos sistemáticos, que podem ser interpretados como fácies químicas, conforme sintetizado no Quadro 1.

Quadro 1: Síntese das fácies químicas (FQ1–FQ5) identificadas no Marco Lula, com indicação dos respectivos elementos diagnósticos e acessórios, bem como sua correspondência com os *clusters* definidos para os poços A, B e C. Os elementos destacados em negrito correspondem aos identificados por quantificação nas análises de MEV-EDS.

Fácies químicas	Elementos diagnósticos	Elementos acessórios	Cluster correspondente		
			Poço A	Poço B	Poço C
FQ1	Ca e Mg	Sr e Mn, Yb	A1	B1	C1
FQ2	Si	-	A2	B2	C4
FQ3	Fe, Al e K	Mg, Mn, Ba, LE, S, Ti	A3/A5	B4	C3
FQ4	Ca, LE e Ba	Sr, Mg, Fe, Al e K, Ti	A4	B3	C2
FQ5	Si, LE e Ba	Na, Yb	-	-	C5

Fonte: A autora (2026).

Com base no Quadro 1 e nas Figuras 7, 8 e 9, verifica-se que o Marco Lula pode ser compartimentado em cinco fácies químicas (FQ1–FQ5), definidas a partir dos elementos diagnósticos que caracterizam os *clusters* reconhecidos nos poços A, B e C (Tabelas 7, 8, 9; Figuras 26, 27 e 28). Essa abordagem permite correlacionar agrupamentos estatísticos a padrões composicionais recorrentes, interpretados como unidades geoquímicas distintas.

Deste modo, verifica-se que os poços A e B, ambos localizados do Campo de Tupi (Figura 1) possuem assinatura química bastante similar, sendo suas sucessões caracterizadas por quatro fácies químicas (FQ1–FQ4; Quadro 1). A FQ5, exclusiva do poço C (Campo de Iracema – Figura 1), constitui um padrão composicional restrito na área analisada e ressalta as particularidades previamente observadas no poço.

De modo geral, tem-se que: FQ1 é caracterizada pela afinidade com Ca e Mg, verifica-se, ainda, uma forte associação com Sr e Mn; FQ2 é caracterizada pela presença de Si, assim como FQ5 (exclusiva do poço C); contudo, neste caso, há uma clara associação entre a presença de Si, LE e Ba. FQ3 ganha relevância pela concentração de Fe, Al e K, admitindo-se que nesta fácies químicas existe uma série de elementos acessórios que não necessariamente ocorrerão sempre associados. FQ4 também ganha relevância pela sua relação com LE e Ba, mas diferentemente de FQ5, FQ4 guarda sua maior afinidade com Ca e Mg (Quadro 1).

5.2.2 MEV-EDS no detalhamento das fácies químicas

Com base nas quantificações e nos mapas composicionais de MEV-EDS obtidos para os poços A e C, observa-se que, além dos elementos identificados por FRX-p, Ti, Na e Yb,

apesar de presentes em pequenas concentrações, são recorrentes e associam-se a fácies químicas específicas (Quadro 1).

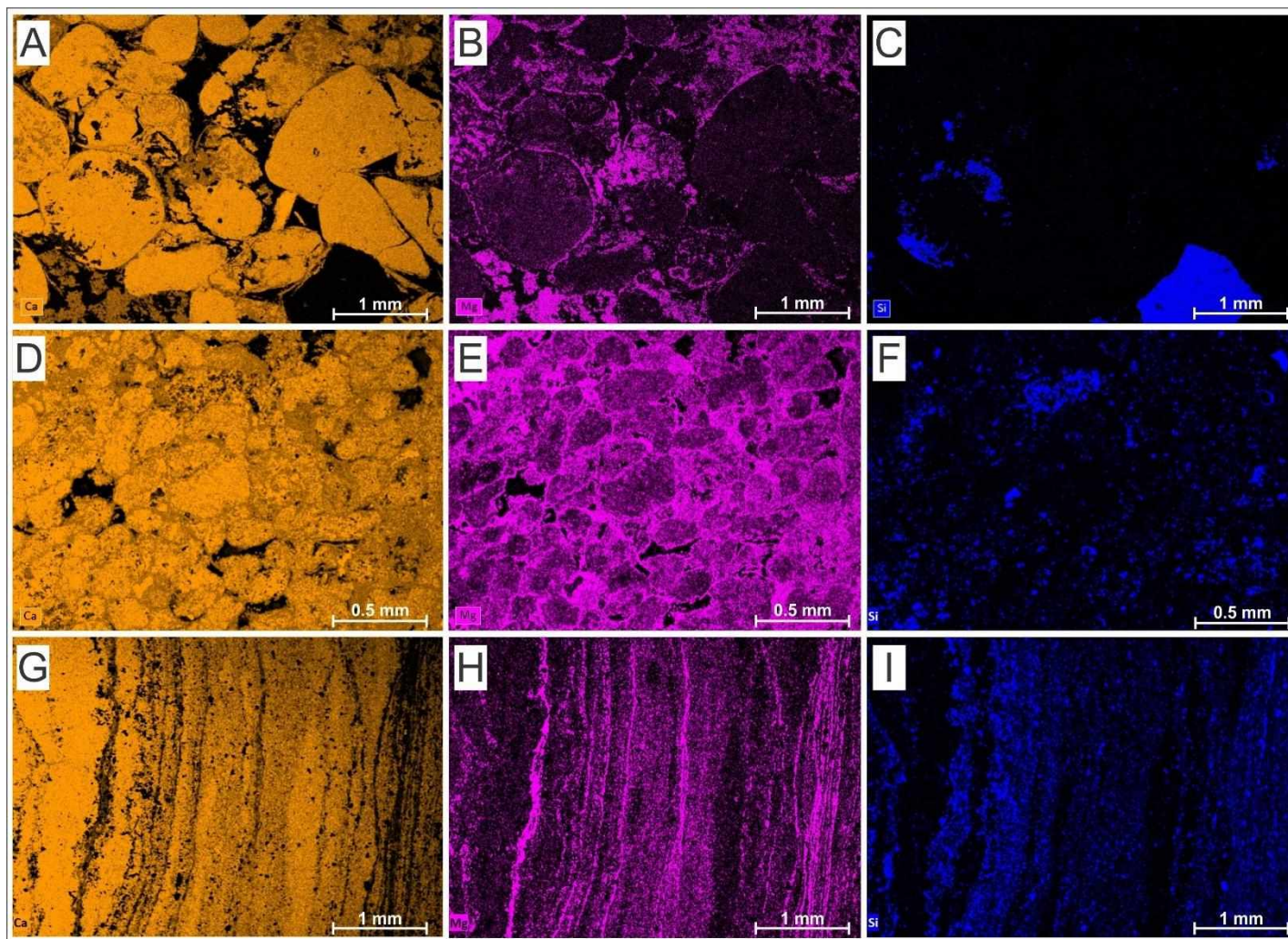
Independentemente da textura e das fácies químicas estabelecidas, Ca e Mg ocorrem de forma homogênea em todas as análises pontuais, sendo, contudo, mais expressivos na FQ1 (Figura 29). Além disso, quantificações por MEV-EDS em exemplares de FQ1 também indicam presença recorrente de Yb, ainda que em baixos percentuais (próximos de 0,35%).

O Si, por sua vez, pode ocorrer de modo mais heterogêneo, sendo comumente identificado em regiões específicas, marcando, por exemplo, a presença de sílica tabular ou nodular, ou, ainda, acompanhando as laminações (Figuras 29). Corroborando a interpretação das fácies químicas, essas ocorrências tendem a ser mais expressivas em FQ2. Nas demais fácies químicas, o Si ocorre pontualmente, de forma menos recorrente, acompanhando as laminações, em pequenos nódulos ou relacionados aos clastos vulcânicos.

Os elementos Fe, Al e K, intimamente relacionados à FQ3, ocorrem de forma mais concentrada nas rochas retrabalhadas, delimitando a ocorrência de clastos e nódulos de sílica. Quando associados aos CLU, estão presentes, predominantemente, concentrados nas laminações (Figura 30). Além disso, análises quantitativas de MEV-EDS indicaram concentrações pontuais de Ti em FQ3 e FQ4. Quando relacionado com FQ3, o Ti tende a apresentar percentuais sutilmente mais elevados, sempre próximos de 1%. Sua ocorrência está associada à presença de Fe, Al e K, explicando a afinidade de Ti com exemplares de FQ3 e FQ4 (Quadro 1).

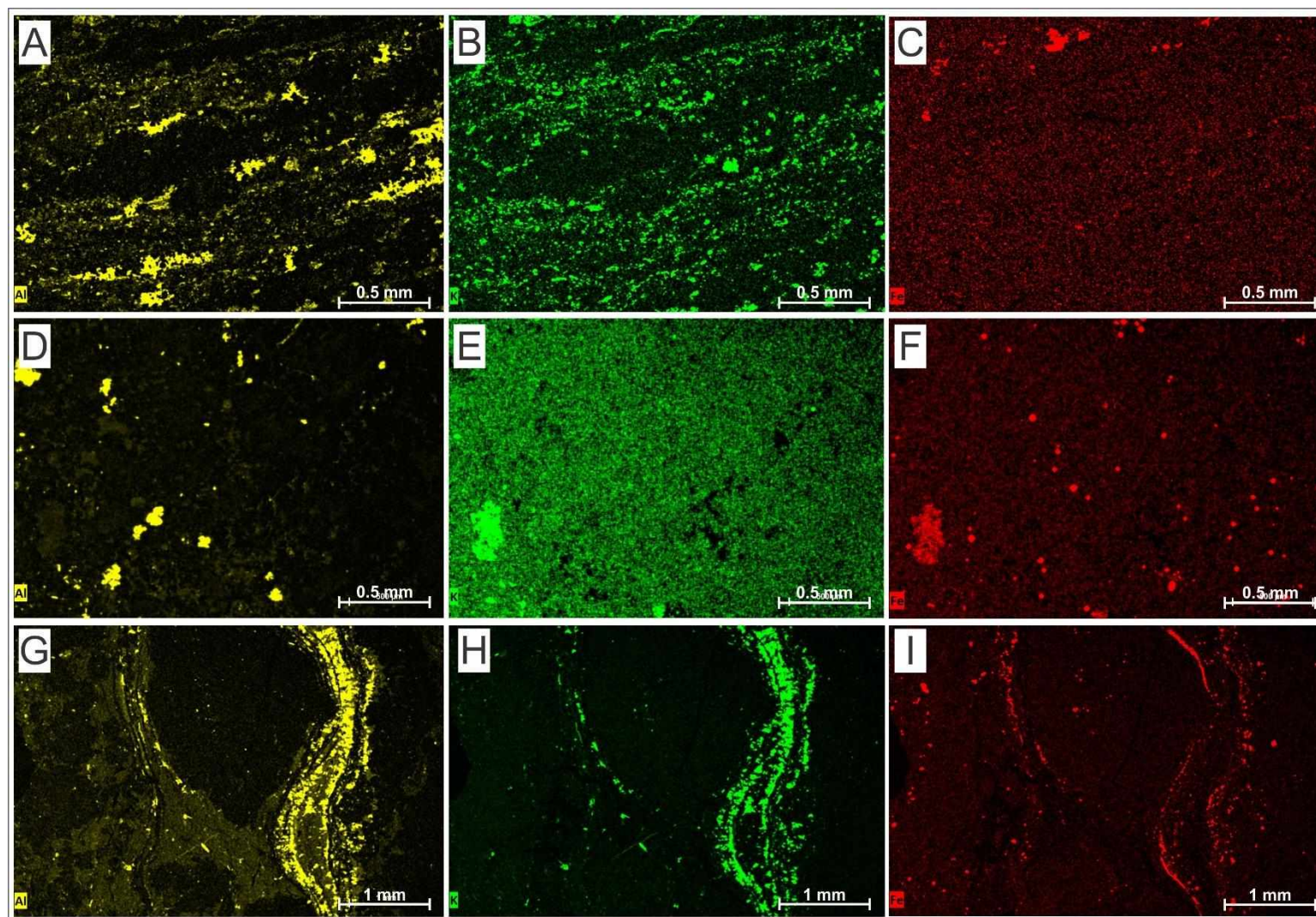
De acordo com dados de FRX-p, uma das principais características de FQ5, restrita ao poço C, são as maiores concentrações de LE. A partir dos dados de MEV-EDS observam-se concentrações relativamente elevadas de Na e Yb em exemplares de FQ5. Essa detecção é relevante, já que permite associar a presença de LE ao Na, elemento que não é detectado pela técnica de FRX-p.

Figura 29: Mapas composicionais ilustrando a distribuição de Ca (A, D e G) e Mg (B, E e H) em diferentes exemplares associados a fácies química FQ1; e de Si (C, F e I) em exemplares de FQ2. Os mapas evidenciam a forma de ocorrência e a distribuição espacial desses elementos nas respectivas fácies químicas, de acordo com a textura de rocha.



Fonte: A autora (2026).

Figura 30: Mapas composicionais com a distribuição espacial de Al (A, D e G), K (B, E e H) e Fe (C, F e I) na fácies química FQ3. As imagens evidenciam os padrões de concentração e a forma de ocorrência dos elementos diagnósticos em diferentes litotipos associados a essa fácies química.



Fonte: A autora (2026)

5.2.3 Padrões químicos do Marco Lula

Conhecido o significado químico das fácies químicas (Quadro 1), podem-se realizar inferências geológicas. Por exemplo, FQ1, FQ3 e FQ4 apresentam afinidade com constituintes carbonáticos. FQ1 é a que melhor preserva as características deposicionais, contudo sua relação com Mg sugere a atuação de processos de dolomitização que afetando a composição primária. Já a afinidade entre Fe, Al, K e Ti em FQ3 sugere a presença de impurezas detríticas nas rochas carbonáticas, o que associado com a presença de Mn, pode indicar momentos de maior oxigenação. Enquanto a associação entre Ca e LE observada em FQ4 sugere condições de águas mais concentradas, possivelmente associadas a episódios de maior alcalinidade e evaporação.

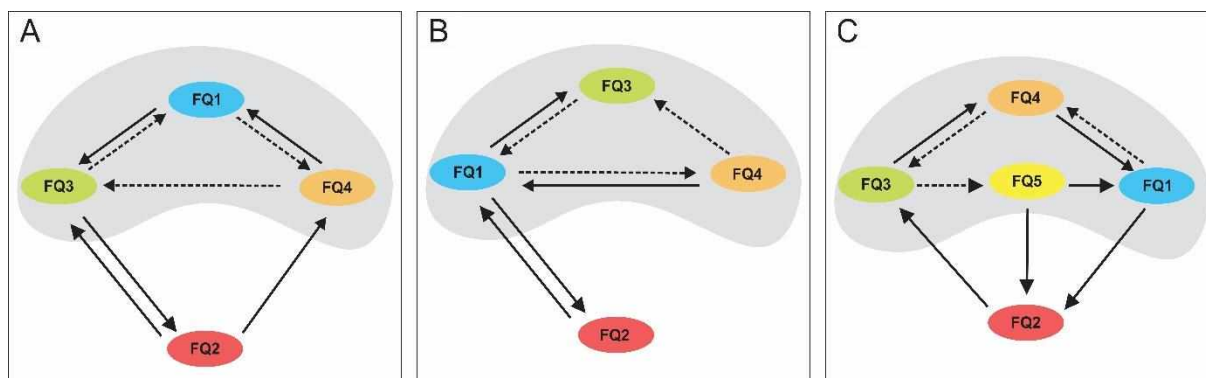
A forte associação de FQ2 e FQ5 com Si sugere que essas fácies químicas estejam marcando a ação de processos de silicificação, contudo, as associações químicas de FQ5 são sugestivas da possível atuação de fluidos hidrotermais modificando de modo mais pervasivo as rochas do Marco Lula, especialmente no Campo de Iracema.

A partir dessas interpretações, buscou-se compreender as relações verticais entre as fácies químicas e, para isso, além dos perfis litológicos (Figuras 8, 9 e 10), foi utilizada a análise de cadeias de Markov (Figura 31), que destacam a maior tendência de transição entre as fácies químicas com afinidade por constituintes carbonáticos. Há em todos os poços (Figura 31) uma tendência recorrente de transição vertical de FQ1 para FQ4 e, subsequentemente, para FQ3, indicando que, assim como as litologias (Figura 23), a composição química varia de forma cíclica, algo especialmente bem definido no poço B, onde as interações com FQ2 são restritas à FQ1 (Figura 31B).

Com relação à FQ2, não se verifica um padrão vertical comum a todos os poços (Figura 30), indicando que a silicificação ocorre sem um controle evidente, conforme já observado na descrição macroscópica. Nos poços B e C (Figuras 31B e C) é possível estabelecer uma relação autoconsistente entre FQ2 e FQ1, fácies químicas associadas, respectivamente, aos processos de silicificação e dolomitização, comumente descritos para o pré-sal.

No poço C, a presença de FQ5 traz maior variabilidade para as transições, afetando diretamente o ciclo básico observado entre FQ1, FQ4 e FQ3 (Figura 31C). Verifica-se que a existência de FQ5 está condicionada a presença de FQ3, relação genética importante que sugere que os constituintes de FQ3 possam ter influência direta na constituição da assinatura química de FQ5.

Figura 31: Cadeias de Markov construídas com base nas fácies químicas identificadas para o Marco Lula nos poços A, B e C (A, B e C, respectivamente). O polígono cinza destaca a separação bem definida entre as fácies químicas FQ1, FQ3 e FQ4 e as linhas tracejadas indicam as maiores probabilidades de transição vertical entre as fácies químicas.



Fonte: A autora (2026).

Apesar das similaridades probabilísticas para as transições das fácies químicas (Figura 31), o percentual de ocorrência, o padrão de empilhamento e a distribuição estratigráfica das FQ1 – FQ5 apresentam características bastante particulares, especialmente quando se compara os poços A e B com o poço C.

Conforme observado nos gráficos das Figuras 7, 8 e 9, as fácies químicas exibem percentuais de ocorrência muito distintos. Por exemplo, a FQ3 é dominante no poço A, enquanto FQ1 é a fácies química mais recorrente nos poços B e C. No geral, o poço A mantém a tendência de exibir percentuais de ocorrência similares para as fácies químicas, enquanto o predomínio de FQ1 no poço B é muito marcante e o poço C, apesar do maior número de fácies químicas, tem marcada recorrência de FQ1, FQ3 e FQ4; as demais apresentam ocorrências pontuais, marcando singularidades dessa sucessão.

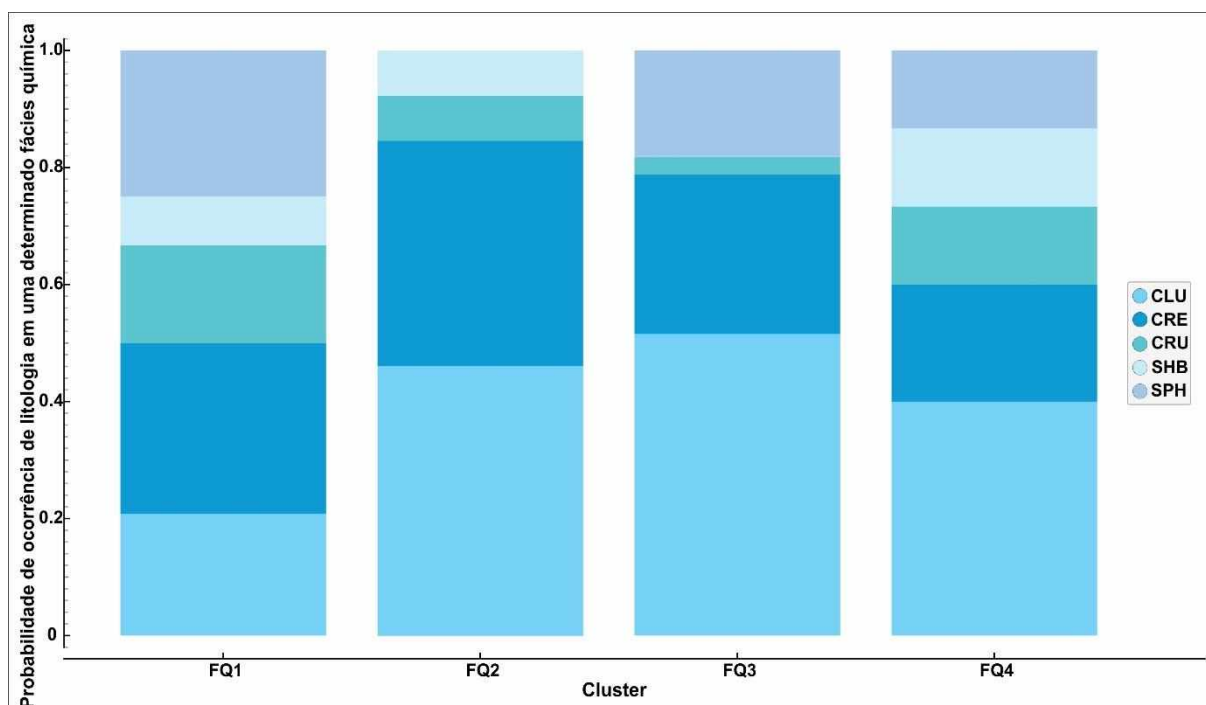
Adicionalmente, destaca-se a significativa variação vertical das fácies químicas, sem um padrão claramente correlacionável entre os poços (Figuras 8, 9 e 10), sugerindo heterogeneidade espacial nos processos geoquímicos atuantes no Marco Lula. Em termos estratigráficos, não há uma distinção evidente na distribuição das fácies químicas. Apenas no poço C (Figura 10) verifica-se uma marcada ocorrência de FQ3 em sua base (entre 4.928 e 4.934 m). Outra particularidade do poço C é que as fácies químicas tendem a formar pacotes de maior espessura individual, sugerindo que as condições físico-químicas do ambiente deposicional ou diagenético foram mais persistentes nesta localidade, em contraste com a maior frequência de alternâncias observada nos poços A e B.

5.3 Integração de dados litológicos e químicos para o Marco Lula

As fácies químicas obtidas por SOM e *k-Means* apresentam correspondência com as litologias descritas para o Marco Lula, conforme pode ser observado nos perfis litológicos dos poços A, B e C (Figuras 8, 9 e 10). Ainda assim, para uma melhor compreensão da relação entre fácies químicas e litologia, trabalhou-se com probabilidades de ocorrência, conforme ilustrado nas Figuras 32, 33 e 34.

De acordo com o gráfico da Figura 32, as fácies químicas FQ1 e FQ4 no poço A ocorrem associadas a todas as litologias descritas. No caso de FQ1, suas maiores probabilidades de ocorrência estão associadas aos CRE e CLU enquanto SHB é a litologia que apresenta a menor relação com essa fácies química. No poço A, há uma tendência de FQ1 ser mais frequente na base (5.055,5 – 5.058 m) e no topo (5.032 – 5.036,3 m) da sucessão (Figura 8). Quando concentrada na base, apresenta maior associação com as rochas retrabalhadas (CRE e CRU); já no topo, apresenta maior afinidade com as rochas formadas *in situ* (CLU, SHB e SPH). Assim, ao analisar o intervalo de estudo de forma integrada verifica-se a grande variabilidade litológica destacada acima.

Figura 32: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3 e FQ4 em função das litologias descritas ao longo do poço A.



Fonte: A autora (2026).

Os percentuais de ocorrência das litologias associadas à FQ4 são ainda mais equilibrados, apenas CLU apresenta valores um pouco mais elevados e, no geral, verifica-se maior probabilidade de ocorrência de FQ4 associada as rochas formadas *in situ* (Figura 32). Esse padrão litológico diverso pode estar relacionado com sua ampla distribuição ao longo do intervalo de estudo (Figura 8).

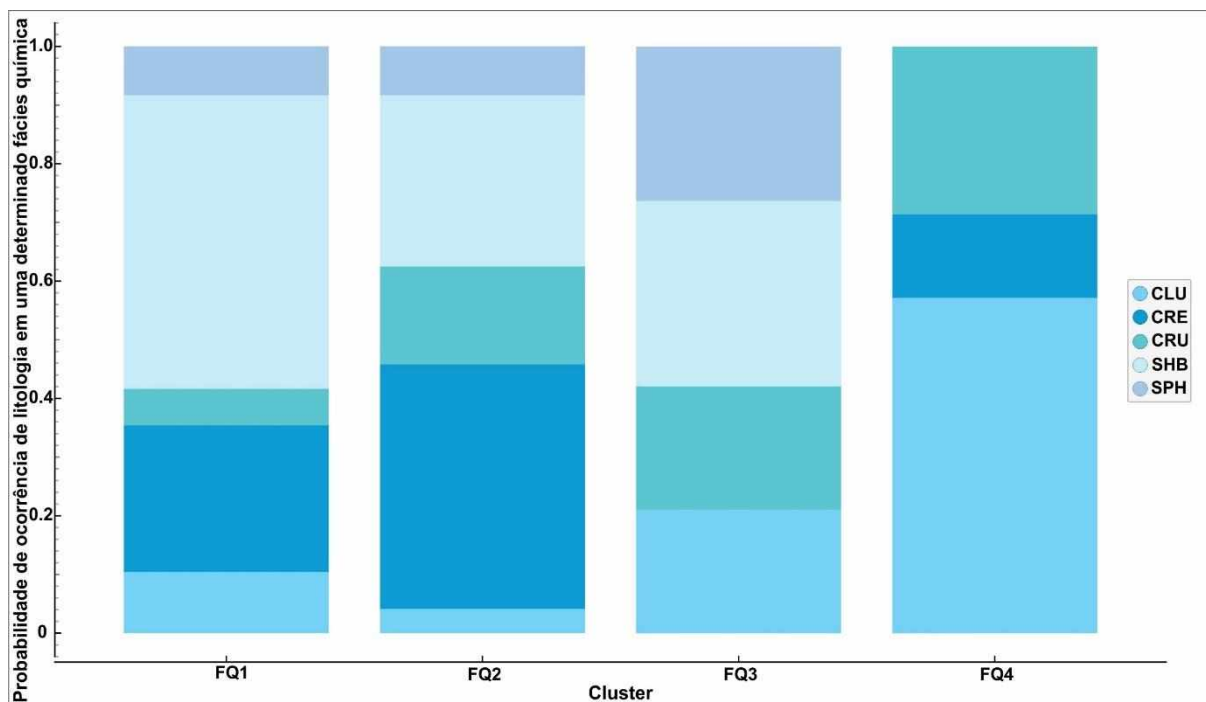
Em contrapartida, FQ2 destaca-se dentre as fácies químicas do poço A por exibir grande afinidade com a ocorrência de rochas retrabalhadas, especialmente CRE, mas também, ocorre em percentuais bastante elevados quando relacionada aos CLU (Figura 32). Destaca-se também, a ausência de exemplares de SPH associado à FQ2. Quanto à sua distribuição, verifica-se uma elevada concentração na porção intermediária do poço A (5038,40 – 5048,00 m; Figura 8), onde ocorre em porções não muito espessas, porém recorrentes.

A FQ3, fácies química mais recorrente do poço A, ocorre associada predominantemente ao CLU, embora sua ocorrência relacionada aos CRE e SPH também seja relevante (Figura 32). FQ3 não ocorre relacionada com SHB e sua probabilidade de ocorrência junto aos CRU é baixa, principalmente quando comparada com CLU, SPH e CRE (Figura 32). Quanto à distribuição vertical, trata-se de uma fácies química bastante homogênea, amplamente distribuída ao longo do intervalo de estudo (Figura 8).

No Marco Lula do poço B, o controle litológico sobre as fácies químicas parece ser mais efetivo do que no poço A, uma vez que as algumas litologias apresentam probabilidades de ocorrência muito mais elevadas quando relacionadas a determinada(s) fácies química(s). Como por exemplo, cita-se os CLU, cuja probabilidade de ocorrência é muito mais elevada em FQ4 do que em todas as demais fácies químicas, ou ainda, CRU cuja presença está associada apenas a FQ1 e FQ2 (Figura 33).

No poço B, as fácies químicas FQ1 e FQ2 são as únicas que estão associadas a todas as principais litologias descritas (Figura 33). Mesmo com essa variabilidade, FQ1 apresenta probabilidade de ocorrência associada aos SHB, com associação também relevante com os CRE. É a fácies química dominante e ocorre bem distribuída ao longo de toda a sucessão (Figura 9). Na FQ2 mantém-se a forte associação com SHB; contudo, ganha destaque a relação com as rochas retrabalhadas (CRE e CRU), cujas probabilidades de ocorrência são mais elevadas do que nas demais fácies químicas (Figura 33). Apesar de bem distribuída ao longo do intervalo de estudo, observa-se uma maior concentração de FQ2 na porção intermediária (4.857,5 – 4.866,3 m) da sucessão analisada onde estão associadas a um espesso pacote de rochas retrabalhadas (Figura 9).

Figura 33: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3, e FQ4 em função das litologias descritas ao longo do poço B.



Fonte: A autora (2026).

A FQ3 associa-se predominantemente com rochas formadas *in situ*. É nesta fácies que se observa um aumento na probabilidade de ocorrência dos CLU, associado à ausência de CRU e redução da expressividade de CRE, principalmente quando comparada com FQ2. Ainda assim, são os SPH e SHB que dominam (Figura 33). FQ3, apesar de bem distribuída ao longo do intervalo de estudo, ocorre de forma mais recorrente no topo do intervalo de estudo, entre aproximadamente 4.845 – 4.857 m de profundidade (Figura 9).

Por fim, FQ4, fácies químicas menos recorrente do poço B, mas que, conforme destacado anteriormente, ganha relevância pela sua relação com CLU. Outra característica de FQ4 no poço B é que, além do CLU, a mesma guarda relação apenas com rochas retrabalhadas (CRE e CRU – Figura 33). Além disso, FQ4 não ocorre no topo da sucessão, sendo sua primeira ocorrência em torno de 4.855 m (Figura 9).

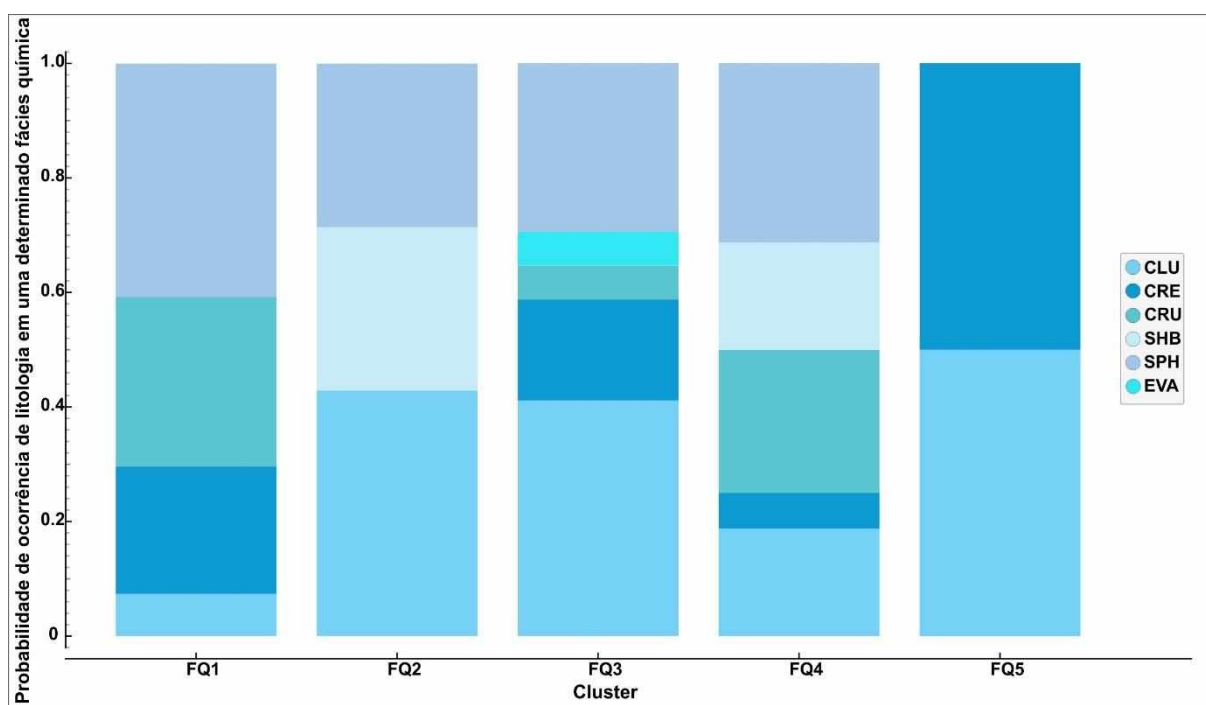
Ao longo do intervalo analisado do poço C, a relação entre litologia e fácies químicas tende a ser, a exemplo do observado no poço A, mais diversa, na qual uma mesma fácies química se associa, com probabilidades equivalentes, a diferentes litologias. A exemplo disto tem-se FQ1 e FQ4 (Figura 34). Em FQ1 a associação se dá com CLU, CRE, CRU e SPH, sendo as maiores probabilidades relacionadas aos intervalos de rochas retrabalhadas e aos SPH (Figura 33). Verifica-se, ainda, que FQ1 concentra-se na porção intermediária e inferior do poço C (4.934,1 – 4.936,4 m; Figura 10) associada a SPH, apresentando, contudo, maior

ocorrência na porção intermediária (4.925,1 – 4.928 m; Figura 10), onde há grande concentração de rochas retrabalhadas (CRE e CRU).

Já FQ4 tem relação com CLU, CRE, CRU, SHB e SPH, contudo, diferentemente de FQ1, apresenta maior afinidade com as rochas formadas *in situ*, CLU, SHB e, especialmente SPH (Figura 34). Apesar de menos recorrente que FQ1, apresenta distribuição semelhante, concentrando-se nas porções inferior e intermediária do poço C (Figura 10).

Ainda pensando em variabilidade litológica relacionada as fácies químicas, tem-se FQ3, cujo destaque é a relação com CLU e SPH, ambas formadas *in situ*, além dos níveis evaporíticos descritos exclusivamente no Marco Lula do poço C (Figuras 10 e 34). Essa fácies química ocorre preferencialmente nas porções superior (4.916 – 4.918,8 m) e inferior (4.928 – 4.934 m) do intervalo analisado, onde rochas formadas *in situ* são mais recorrentes (Figura 10).

Figura 34: Gráfico de barras representando a probabilidade de ocorrência das fácies químicas FQ1, FQ2, FQ3, FQ4 e FQ5 em função das litologias descritas ao longo do poço C.



Fonte: A autora (2026).

Por fim, tem-se FQ2 e FQ5, que além de serem as fácies químicas mais restritas da sucessão analisada (Figura 10), são as que apresentam mais homogeneidade com relação a distribuição litológica. FQ2 está associada exclusivamente as rochas formadas *in situ* (CLU, SHB e SPH), conforme indica a Figura 34. Quanto à distribuição há uma tendência de FQ2 ocorrer mais concentrada no topo da sucessão, entre 4.916,5 e 4.921,1 m, apesar de também

estar presente na porção inferior, como por exemplo, em 4.936,5 m (Figura 10). Já FQ5, fácies química mais restrita da sucessão e exclusiva do poço C, associa-se apenas aos CLU e CRE. Sobre FQ5, tem-se que a mesma ocorre apenas em 4.918,1 e 4.929,8 de profundidade e, com isso, não se pode estabelecer nenhuma tendência.

Mesmo com toda a variação descrita, que deixa claro que a relação entre litologia e assinatura química não é única, é possível estabelecer tendências principais de associação entre as características litológicas e químicas do Marco Lula, conforme discriminado no Quadro 2.

Quadro 2: Síntese das fácies químicas (FQ1–FQ5) identificadas no Marco Lula, com indicação dos respectivos elementos diagnósticos, bem como sua correspondência com as litologias dominantes para os poços A, B e C e seu significado geológico.

Fácies químicas	Composto diagnóstico*	Litologia dominante	Significado geológico
FQ1	Ca e Mg	CLU, SHB e SPH	Dolomitização
FQ2	Si	CRE e CLU	Silicificação pervasiva
FQ3	Fe, Al e K	CLU, SHB, SPH e CRE	Incremento no aporte detrítico
FQ4	Ca, LE e Ba	CLU	Episódios de maior evaporação
FQ5	Si, LE e Ba	CLU e CRE	Atuação de fluidos hidrotermais

Fonte: A autora (2026).

Estabelecidas as relações entre as litologias e as fácies químicas que caracterizam o Marco Lula nos poços A, B e C (Figuras 32, 33 e 34; Quadro 2), observa-se, ainda, a ocorrência de tendências litológicas e químicas associadas aos picos de urânio, feição característica desse intervalo estratigráfico e frequentemente utilizada para seu reconhecimento.

No poço A, através dados petrofísico observa-se uma relação entre anomalias de urânio e litologias formadas *in situ*, especialmente os CLU e SPH. Nessa sucessão, os CLU associados aos valores mais elevados de urânio frequentemente exibem laminações irregulares a crenuladas. Nota-se também uma forte afinidade com a fácies química FQ3, que engloba rochas carbonáticas ricas em sedimentos detríticos. Adicionalmente, observa-se que no poço A as anomalias de urânio são sempre acompanhadas por valores aumentados de potássio e tório, o que reforça a natureza detrítica de alguns dos constituintes dessas rochas e ratifica a interpretação de FQ3 (Figura 8).

As exceções a esse padrão observadas no poço A relacionam-se às fácies químicas. Há uma anomalia de urânio em torno de 5.045 m de profundidade em que a associação ocorre entre SHB e FQ2, e outra, próxima de 5.040 m, onde se tem CLU relacionado à FQ4 (Figura 8).

Um padrão semelhante, com picos de urânio associados a CLU e SPH e à FQ3, repete-se ao longo do poço B (Figura 9). Nesse caso, as exceções mais marcantes ocorrem na base do Marco Lula, em torno de 4.868 m e próximo de 4.873 m, onde os picos de urânio associam-se ao SHB e à fácies química FQ1 (Figura 9), representativa da fase carbonática livre de impurezas.

Ao longo do intervalo de estudo do poço C verificam-se padrões distintos relacionados aos picos de urânio. Em direção à base, ocorrem CLU e SPH associados à FQ3, relação dominante nos poços A e B. Em direção ao topo, observa-se maior diversidade de associações: inicialmente, rochas formadas *in situ* e retrabalhadas associam-se às fácies FQ1 e FQ4; e nas porções mais rasas do intervalo de estudo (4.916 – 4.921 m; Figura 10), onde se registram picos de urânio de elevada intensidade, a associação ocorre entre CLU e FQ2.

6. DISCUSSÕES

6.1 Metodologia aplicada na definição de fácies químicas

Apesar de estudos recentes proporem abordagens metodológicas envolvendo análise multivariada de dados para reduzir as incertezas e aumentar a confiabilidade dos dados químicos obtidos por FRX-p (*e.g.*, dos Santos *et al.*, 2025; Kodikara *et al.*, 2024; Plantz e Borghi, 2023), optou-se por um pré-processamento distinto do que vem sendo proposto. Dentre as particularidades do fluxo de trabalho adotado neste estudo, destacam-se: (i) a manutenção dos *outliers* na base de dados e (ii) o uso de mapas auto-organizáveis (SOM) para redução da dimensionalidade, em substituição à análise de componentes principais (PCA).

Admite-se que a remoção de valores extremos (*outliers*) pode eliminar registros que, na realidade, representam variações geoquímicas associadas a processos sedimentares ou diagenéticos localizados. Assim, a manutenção desses valores permite que eventos pontuais, como a ocorrência de nódulos de sílica ou enriquecimentos localizados em bário (Ba) e enxofre (S), sejam preservados na análise. Essa estratégia evita a homogeneização artificial da sucessão, garantindo que os algoritmos de agrupamento capturem a heterogeneidade natural do sistema sedimentar.

A aplicação de redes neurais artificiais por meio de SOM, em substituição à PCA, foi outra abordagem adotada para evitar a simplificação excessiva dos dados. Isto porque a PCA projeta as variáveis em um sistema de eixos lineares que maximiza a variância explicada, contudo, essa abordagem pode mascarar padrões complexos presentes em sistemas heterogêneos. Em contraste, o SOM utiliza um processo de aprendizado competitivo capaz de preservar a topologia do espaço multidimensional de dados, mantendo relações de vizinhança entre amostras semelhantes. Como resultado, o algoritmo organiza as amostras em uma malha bidimensional, permitindo uma identificação mais robusta de agrupamentos naturais e de transições geoquímicas ao longo da sucessão estratigráfica.

Vale destacar que discussões metodológicas dessa natureza são recorrentes na literatura e, desde Cherkassky e Mulier (1998), há a argumentação de que, diferentemente da PCA, que se baseia em combinações lineares, o SOM é considerado um método não linear para a representação de dados de alta dimensionalidade, sendo utilizado com frequência como ferramenta para redução da dimensionalidade dos dados sem gerar grandes homogeneizações.

Sabendo que Plantz e Borghi (2023) fizeram uso de dados oriundos de um dos poços utilizados neste estudo de caso (poço A), as adaptações metodológicas propostas puderam ser verificadas. Os autores utilizaram dados obtidos por um analisador de FRX portátil, porém com espaçamento de análises de 10 cm, tendo, portanto, uma maior densidade de medidas.

Após as etapas de pré-processamento e processamento de dados, em uma abordagem baseada em redução da dimensionalidade por PCA e agrupamento por *k-Means*, Plantz e Borghi (2023) identificaram cinco *clusters* (C1, C2, C3, C4 e C5). De acordo com os autores, C1 reflete a composição química mais comum no intervalo estudado, caracterizada por maiores teores de Ca, preservando a assinatura química deposicional. Os *clusters* C2 e C3 refletem um aumento progressivo de Si acompanhado pela diminuição dos demais elementos, indicando níveis de silicificação. O *cluster* C4, caracterizado pela associação entre Ca e Mg, foi relacionado à atuação mais efetiva de processos de dolomitização, enquanto C5 representa uma ocorrência pontual de minerais incomuns na assembleia mineral carbonática do pré-sal, com ocorrência de barita, por exemplo.

Embora este estudo aborde mais dois poços (B e C), quando comparado com o trabalho de Plantz e Borghi (2023), os resultados obtidos indicam fácies químicas multielementares como, por exemplo, a influência marcante de Fe, Al e K, além da ocorrência de Mg, Mn, Ba, LE e S como elementos acessórios em FQ3 (Quadro 1), refletindo associações mineralógicas mais complexas e diversificadas do que as apresentadas pelos referidos autores. Adicionalmente, os resultados destacam a presença de fácies químicas caracterizadas pela

combinação entre Ca e Mg (FQ1) e níveis enriquecidos Si (FQ2), indicativos a presença de níveis dolomitizados e silicificados, respectivamente, conforme aqueles descritos por Plantz e Borghi (2023).

Apesar do Ba ter sido identificado como elemento diagnóstico no estudo de Plantz e Borghi (2023), as fácies químicas definidas neste estudo apontam para uma associação relevante entre Ba e LE, tanto em rochas essencialmente carbonáticas (FQ4) quando em rochas afetadas pela silicificação (FQ5 – Quadro 1). Desse modo, as fácies químicas evidenciam relações pouco comuns e raramente discutidas para a assembleia típica do pré-sal, as quais podem ter sido suprimidas ou diluídas, mesmo em abordagens recentes, em função das etapas de pré-processamento dos dados.

Admite-se que as fácies químicas mais diversificadas caracterizadas neste estudo indicam uma maior variação composicional para o intervalo de estudo. Assim, observa-se que Plantz e Borghi (2023) enfatizam tendências gerais associadas às principais variações do conjunto de dados, enquanto a aplicação do SOM possibilitou explorar tanto as relações gerais do intervalo quanto identificar associações elementares e consequentemente mineralógicas adicionais.

6.2 Comparação entre os poços e implicações para os processos deposicionais e diagenéticos do Marco Lula

A integração proposta neste estudo possibilita identificar, em cada poço investigado, semelhanças, essenciais para a compreensão do modelo deposicional e processos diagenéticos, mas também particularidades intrínsecas a condições e controles específicos, que não se estendem por grandes áreas. Tendo, portanto, diferentes desdobramentos possíveis para uma melhor compreensão do Marco Lula.

6.2.1 Padrão litológico e o modelo deposicional

Considerando as similaridades entre os três poços analisados, observa-se que os mesmos apresentam idêntica constituição litológica (CLU, SPH, SHB, CRE e CRU), com características texturais e químicas, bem como estruturas sedimentares e constituintes diagenéticos que apresentam correspondência. A relação autoconsistente entre as rochas formadas *in situ* (CLU, SPH e SHB; Figura 24) sugere um padrão recorrente de empilhamento vertical no Marco Lula e que se aproxima dos modelos propostos e defendidos por Wright (2022), Basso *et al.* (2020),

Lima e De Ros (2019) e Wright e Barnett (2014, 2015), para os litotipos *in situ* das formações Barra Velha (Bacia de Santos) e Macabu (Bacia de Campos).

Nesses trabalhos, tal arranjo é interpretado como expressão de ciclos evolutivos em ambientes evaporíticos, com precipitação puramente abiótica cuja variação textural é indicativa de momentos de retração e expansão lacustre, em que CLU está associado a maior expansão e SHB as fases de retração, conforme ilustra a Figura 7. No poço A, observa-se que esses ciclos são representados, na maioria das vezes por apenas CLU e SPH, indicando, de acordo com o modelo, condições de mais baixa energia, sob lâmina d'água relativamente mais alta. No poço B, os ciclos também se apresentam incompletos, porém mais associados a SPH e SHB, apontando, deste modo, para predomínio de precipitação em momentos de maior evaporação e retração lacustre. O poço C, por sua vez, destaca-se pelos maiores percentuais de ocorrência de SPH, sugerindo predomínio de precipitação sob condições intermediárias, que ora relaciona-se mais aos CLU ora ocorre associado a camadas de SHB.

Embora esse modelo de expansão e retração lacustre se aplique de maneira consistente para explicar a relação cíclica entre CLU, SPH e SHB nas rochas do pré-sal, ainda existem controvérsias em relação à sua efetividade para a compreensão de todas as características descritas para o Marco Lula. Isto porque o modelo não prevê a existência de textura peloidal a grumosa e laminações irregulares e crenuladas, frequentemente observadas no intervalo de estudo. Tais características são utilizadas por diversos autores (*e.g.*, da Silva *et al.*, 2025; Plantz *et al.*, 2024; Sanabria, 2022; De Ros, 2021; Pietzsch *et al.*, 2020; Tosca e Wright, 2018) para defender a origem microbiana do Marco Lula.

Nos trabalhos de Chafetz *et al.* (2018) e Saller *et al.* (2016), discute-se a influência microbiana na formação dos *shrubs* e esferulitos. No entanto, foi a análise dos CLU que permitiu a identificação das evidências mais contundentes e que aproximam a interpretação do Marco Lula à uma extensa planície microbiana (da Silva *et al.*, 2025). De acordo com os autores, a deposição do Marco Lula ocorre em contexto de lâmina d'água rasa, sujeita a períodos de exposição subaérea, porém, com condições de alcalinidade inferiores às necessárias à precipitação dos SHB, sendo, portanto, favorável ao desenvolvimento de esteiras microbianas (da Silva *et al.*, 2025).

Com base nas observações deste estudo, sugere-se que o Marco Lula tenha momentos em que predominam condições de precipitação menos influenciada por colônias microbianas, permitindo a formação dos CLU com laminação plano-paralela, SPH e SHB, de acordo com o ciclotema de fácies típico do pré-sal. A instalação dessas planícies microbianas ocorre em períodos menos estressantes e, conforme já sugerido por Luiz *et al.* (2026), da Silva *et al.* (2025)

e Carvalho e Fernandes (2021), pode estar relacionada com a ocorrência de incursões marinhas na fase final de deposição do pré-sal. Conforme observado, o poço A é o que possui essa fase microbial melhor desenvolvida ao longo de sua sucessão.

Neste contexto, ainda é necessário compreender os mecanismos e condições de formação das rochas retrabalhadas. Atualmente coexistem duas hipóteses, de acordo com Gomes *et al.* (2020) e Lima e De Ros (2019), esses depósitos estão associados a condições de maior energia, em ambientes de águas rasas, resultantes da atuação de ondas e correntes, ou de processos gravitacionais, este último sendo o processo mais provável devido o predomínio de CRE e CRU maciços. Em estudo mais recente, Medeiros *et al.* (2024) associam a presença das rochas retrabalhadas do topo da Formação Barra Velha a períodos de expansão do lago, quando as condições seriam favoráveis à formação de barreiras contínuas ou, ainda, aglomerados de montículos em resposta à ação de ondas ou à ação de fluxos hiperconcentrados (*sensu* Nemec e Steel, 1984 e Zavala, 2020).

Especificamente no Marco Lula, verifica-se que as rochas retrabalhadas podem ocorrer em diferentes fases do ciclotema de formação das rochas *in situ*. Para os poços A e B, as cadeias de Markov mostram maior probabilidade de, em resposta a eventos de alta energia e retrabalhamento, SHB ser sucedido por CRE e, também, CLU com laminação plano-paralela ser sobreposto por CRU. Importante indicativo de que eventos de alta energia podem ser desencadeados tanto em momentos de retração quanto de expansão da coluna d'água. Em contrapartida, no poço C a relação se dá apenas por SHB, indicando que esses eventos de alta energia são desencadeados, preferencialmente, em períodos de menor lâmina d'água, indicando, possivelmente, flutuações de alta frequência nas condições hidráulicas (Saller *et al.*, 2016, Gierlowski-Kordesch, 2010, Eugster e Hardie, 1975), em um padrão oposto ao observado por Medeiros *et al.* (2024).

Apesar do padrão reconhecido, as rochas retrabalhadas revelam assinaturas deposicionais distintas para o Marco Lula. O poço A destaca-se pelo maior volume de sedimentos grosseiros, formando camadas de até 4 m de espessura, e pela presença conspícua de clastos vulcânicos, sugerindo uma maior proximidade a altos estruturais expostos ou maior influência de fluxos gravitacionais de alta energia.

No poço B, embora as rochas retrabalhadas sejam expressivas, elas ocorrem de forma mais intermitente e intercaladas aos SHB, indicando episódios de alta energia intimamente associados aos períodos de rasamento do sistema lacustre, interrompendo a precipitação *in situ*. Já poço C apresenta a sucessão retrabalhada mais delgada e singular, marcada pela ocorrência localizada de CRE rico em bioclastos (ostracodes) articulados e uma menor influência de

fragmentos vulcânicos, o que aponta para um ambiente de deposição possivelmente mais distal ou protegido em relação às áreas fontes de material detrítico.

6.2.2 Padrão composicional e suas implicações deposicionais e diagenéticas

Para trazer mais detalhe à caracterização do Marco Lula, foram identificadas variações composicionais que, mesmo em lâminas petrográficas, vão além da capacidade descritiva, principalmente quando se trabalha com rochas de granulometria fina e intensamente substituídas por dolomita, como no caso do intervalo de estudo. Os resultados revelam que a distribuição dos elementos maiores e traços não é homogênea entre os poços, refletindo as intensidades variadas de processos diagenéticos (silicificação e dolomitização) e variações no aporte detrítico.

A integração dos agrupamentos estatísticos permitiu a definição de um modelo quimioestratigráfico robusto para o Marco Lula. Neste contexto, a transição entre fácies químicas ricas em carbonatos (FQ1, FQ3 e FQ4) e fácies químicas silicificadas (FQ2 e FQ5) reflete não apenas o controle deposicional primário, mas a complexa história diagenética do intervalo de estudo.

Assim como observado na caracterização textural, é o poço C que apresenta a maior variabilidade composicional, possivelmente associado à sua posição paleogeográfica mais distal ou à influência de fluidos baciais enriquecidos em bário (FQ5) associados a hidrotermalismo. Além disso, observa-se nas lâminas petrográficas do poço C os maiores percentuais de dolomita em sela, cuja ocorrência está associada as temperaturas mais elevadas (superiores a 60 °C; Spötl e Pitman, 1998) do modelo diagenético do pré-sal (Carramal *et al.*, 2022; Carvalho *et al.*, 2022;; Lima e De Ros, 2019; Sartorato, 2018). Conforme descrito por Lima e De Ros (2019) para o pré-sal da Bacia de Campos, a associação entre sílica (Si), barita (Ba), celestina e dolomita em sela constitui uma paragênese mineral incompatível com as rochas carbonáticas do pré-sal, o que ratifica a proposta de atividade hidrotermal mais intensa na área do poço C.

Ao considerar o significado e as relações litológicas das fácies químicas comuns (FQ1, FQ2, FQ3 e FQ4 – Quadro 2), observa-se que a FQ1 é a que melhor preserva as características deposicionais, ainda assim, tem-se atuação de processos de dolomitização. Sua ocorrência coincide com profundidades onde a dolomita é comum e, por vezes, pervasiva. Análises de lâminas petrográficas indicam que dolomita ocorre, preferencialmente como mosaico, blocosa, lamelar e romboédrica. Autores como Carvalho *et al.* (2022), Carramal *et al.* (2022), Lima e

De Ros (2019) e Sartorato (2018) admitem que todas essas texturas são associadas a fases de dolomitização eodiagenética. A dolomita mosaico e blocosa estão, normalmente, associadas a cimentação e substituição pervasiva, enquanto dolomita lamelar é associada a poros de contração da argila, sendo esta a fase mais tardia dentre as citadas acima (Carramal *et al.*, 2022; Wright e Barnett, 2020;).

A fácies química FQ2, por sua vez, corresponde aos níveis de maior silicificação. Sua ocorrência mais pontual, aliada à forte assimetria positiva do Si observada nos dados químicos brutos dos três poços, corrobora as observações petrográficas de silicificação descontínua, na forma de nódulos e níveis tabulares, que geram picos elementares isolados na base de dados. A afinidade de FQ2 com CLU e CRE (Quadro 2), associada às formas de ocorrência da sílica, indica a atuação de mecanismos distintos: no primeiro caso, a circulação de fluidos diagenéticos parece aproveitar o acamamento da rocha, enquanto no segundo, a circulação ocorre provavelmente pelo espaço permo-poroso, formando feições nodulares irregulares (Watahe *et al.*, 2025; Pereira *et al.*, 2023).

A FQ3, fácies química com assembleia elementar mais destoante daquela comum para o pré-sal, reflete níveis de maior aporte detrítico sendo semelhante àqueles descritos por dos Santos *et al.* (2025) para a Formação Barra Velha e, também, por Luiz *et al.* (2026) para o Marco Lula. Conforme o Quadro 2, essa fácies química está predominantemente associada às rochas formadas *in situ*, com destaque para os CLU. Mapas composicionais de MEV-EDS indicam que essa assembleia detrítica ocorre preferencialmente associada as laminações irregulares e crenuladas dos CLU, as mesmas utilizadas como evidência de atividade microbiana.

Apesar da dificuldade imposta pela intensa modificação diagenética, um estudo geoquímico recente (Luiz *et al.*, 2026) encontrou o mesmo padrão de distribuição de minerais detríticos nos CLU. Os referidos autores observaram que compostos como Al_2O_3 e K_2O , típicos de minerais detríticos, ocorrem em maiores percentuais associados aos CLU com laminações irregulares e crenuladas e que tais compostos estão concentrados nas laminações, possivelmente aprisionados em estruturas geradas pela atividade microbiana. Esse processo, descrito como *trapping and binding* (*sensu* Suarez-Gonzalez *et al.*, 2019), é característico de tapetes microbianos subaquosos, desenvolvidos em áreas com maior aporte de sedimentos detríticos. Adicionalmente, sabe-se que esses CLU apresentam elevados valores de matéria orgânica (Plantz *et al.*, 2025; Lehn e Vasconcelos, 2025), indicando significativa presença de matéria orgânica, o que pode ser somado como mais uma evidência da presença de esteiras microbianas.

Vale destacar que FQ3 é uma das fácies químicas mais diversas e, além de influência de minerais detríticos, há evidências de presença de dolomita e barita, indicando processos pós-

deposicionais específicos, além da ocorrência de Mn, que sugere mudanças nas condições de oxigenação.

Apesar da menor ocorrência, existem CLU associados à FQ4, cuja associação elementar pode ser indicativa episódios de maior evaporação, possivelmente associada a circulação marinha. Padrão similar também foi identificado por Luiz *et al.* (2026), que conseguiu identificar associações entre Na e Cl, indicativas da presença de halita, algo que, neste estudo, não pode ser confirmado.

6.2.3 Padrões litológico e composicional e as anomalias de urânio

Conhecidos os padrões litológicos e químicos do Marco Lula e suas implicações na interpretação paleoambiental, é possível, através de uma análise comparativa, discorrer sobre possíveis controles para os padrões de raios gama total e espectral característicos do intervalo (Figuras 2, 8, 9 e 10).

Ao analisar o comportamento das curvas de raios gama, observa-se que, embora todos os poços exibam picos e vales bem definidos, feição típica do Marco Lula, o número e a intensidade dos picos variam (Figura 2). No poço A, as curvas de raios gama apresentam cerca de oito picos, enquanto no poço B esse número pode chegar a dez. Já no poço C, foram identificados sete picos. Segundo Plantz *et al.* (2024), esses picos guardam forte correlação com a presença de rochas finas formadas *in situ*, como os CLU e os SPH. Assim, a variação observada entre os poços reflete diretamente a proporção relativa dessas litologias.

As observações realizadas nos poços A, B e C complementam a proposição dos autores, uma vez que se verifica que picos de urânio também podem ocorrer intimamente associado aos SHB, como no poço B. Ademais, verifica-se que, quando os picos estão associados aos CLU, esses litotipos tendem a apresentar laminações irregulares e crenuladas, estando frequentemente relacionados à FQ3, fácies química que indica um aumento no aporte detrítico. O urânio, contudo, não necessariamente possui a mesma origem, podendo estar associado à redução e precipitação de urânio induzidas pela atividade microbiana, processos capazes de promover enriquecimento local, especialmente nas laminações, onde ocorre adsorvido à matéria orgânica (Plantz *et al.*, 2025; Klaja e Dudek, 2016; Bell, 1993).

Existem, ainda, associações relevantes entre os picos de urânio e as fácies químicas FQ1 e FQ2. No caso da FQ1, observa-se que a litologia dominante é SHB, cuja formação está associada a períodos de retração da coluna d'água e elevadas taxas de evaporação, condições que favorecem a precipitação de shubs. Nesse contexto, o enriquecimento em urânio pode estar

relacionado às elevadas taxas de evaporação, que favorecem sua mobilização e redistribuição no sistema deposicional (Plantz *et al.*, 2025; Yang *et al.*, 2015).

Considerando que FQ2 é caracterizada por níveis de intensa silicificação, a associação entre picos de urânio e essa fácies química pode refletir tanto a preservação de uma assinatura geoquímica relacionada à matéria orgânica originalmente presente e, posteriormente, substituída por sílica durante a diagênese, hipótese compatível com a afinidade do urânio por matéria orgânica em sistemas sedimentares (Spirakis, 1996). Alternativamente, o enriquecimento em urânio pode estar relacionada a processos pós deposicionais associados à circulação de fluídos, capazes de mobilizar e reconcentrar urânio em intervalos específicos (Plantz *et al.*, 2025; Geisler *et al.*, 2002).

Portanto, as anomalias de urânio no Marco Lula não aparentam ter uma origem única, sendo moduladas tanto por processos biogênicos (em CLU) quanto por processos físico-químicos evaporíticos (em SHB).

6.2.4 Heterogeneidades na distribuição vertical e lateral do Marco Lula

Apesar dos padrões recorrentes no Marco Lula presente em todas as sucessões analisadas, existem feições únicas de cada poço, com destaque para o poço C. Neste poço, as variações são mais evidentes, já que apresenta níveis de evaporitos, CRE ricos em bioclastos, além dos CLU que exibem, em alguns intervalos, tonalidades esverdeadas. Essa feição cromática demanda análises adicionais, mas sugere, preliminarmente, diferenças na origem dessas rochas, possivelmente um ambiente mais redutor ou influência de argilominerais específicos trazidos de uma fonte detrítica. Ademais, este poço apresenta uma fácies química exclusiva (FQ5), indicativa de atividade hidrotermal.

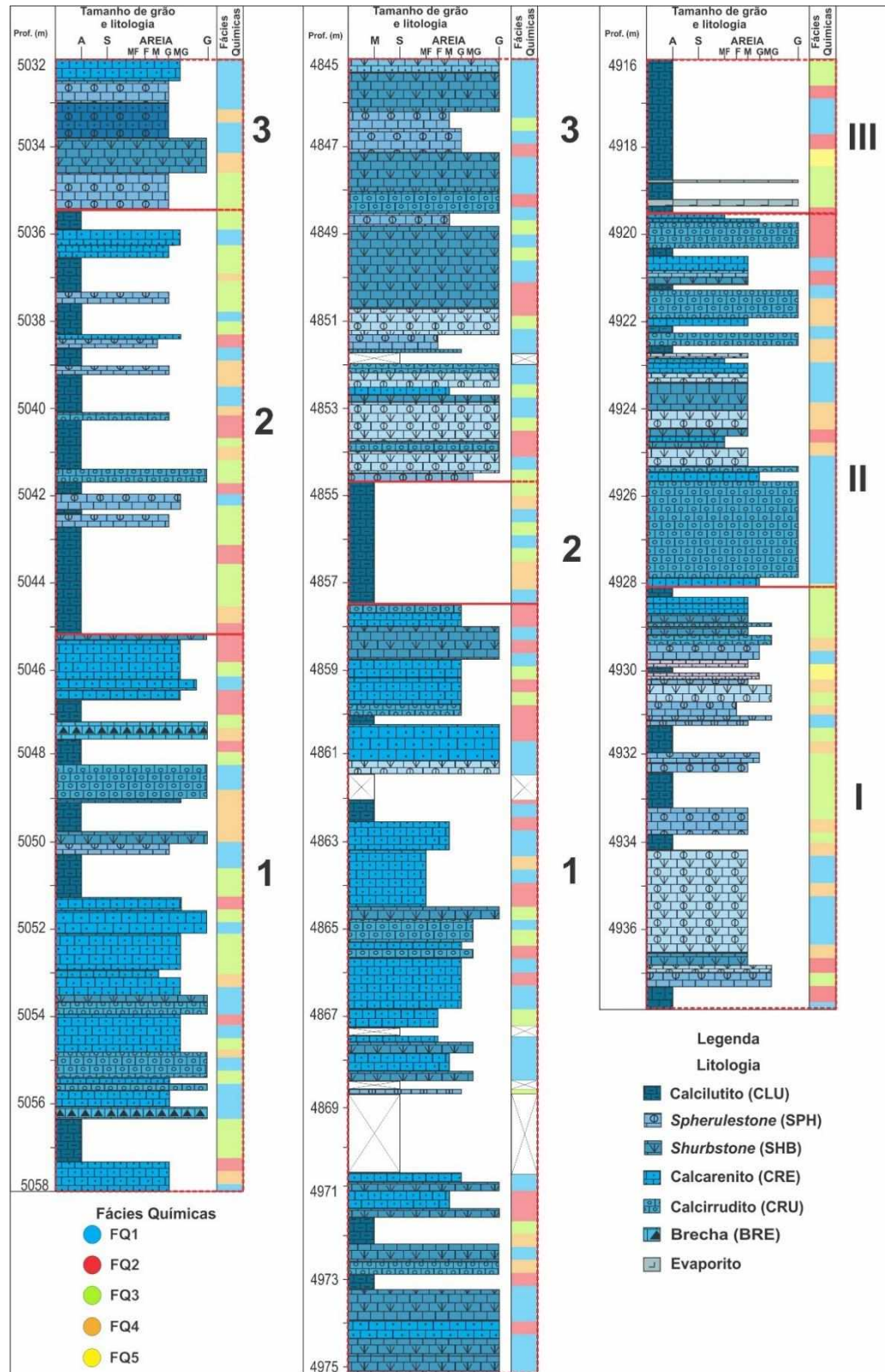
Variações relacionadas tanto as proporções litológicas quanto a intensidade dos processos diagenéticos, também são evidenciadas, especialmente nas rochas formadas *in situ*. No poço A, destaca-se o predomínio de CLU e a silicificação pervasiva, que frequentemente oblitera as texturas primárias e preenche a porosidade remanescente. Por outro lado, o poço B apresenta a maior abundância de SHB e uma melhor preservação da composição primária, evidenciada pela presença de *shrubs* calcíticos. Já o poço C, exibe uma sucessão dominada por SPH, com o registro singular de camadas evaporíticas e ocorrência de dolomita em sela em maiores proporções, sugerindo uma maior influência de condições hipersalinas e, possivelmente, de fluidos de soterramento ou hidrotermais associados a tectônica singular do Campo de Iracema, algo ratificado por FQ5.

Essas heterogeneidades geram variações verticais e laterais, que merecem ser destacadas. Conforme descrito, os poços A, B e C apresentam ao menos três padrões de empilhamento facilmente distinguíveis, indicados como 1, 2 e 3 na Figura 35. A base dos poços A e B (padrão de empilhamento 1 na Figura 35) é caracterizada por CRE e CRU, organizados preferencialmente em padrões *coarsening-up*, indicando um momento na bacia em que o retrabalhamento por processos trativos era frequente. Dentre as litologias formadas *in situ*, destaca-se a recorrência de CLU com laminação plano-paralela no poço A e SHB no poço B (Figura 35), que se associado ao ciclotema de Wright e Barnett (2014, 2015), pode representar uma variação lateral, em que no poço A atinge-se condições de lâmina d'água mais espessa do que no poço B.

Ao analisar as fácies químicas, o que mais ganha destaque é a heterogeneidade, tanto vertical quanto ao comparar as duas sucessões (Figura 35). Na base do poço A, a ocorrência de FQ1, FQ3 e, em menor proporção FQ4, destaca o padrão de transição indicado nas cadeias de Markov (Figura 31), cujas alternâncias refletem variações recorrentes relacionadas a flutuações no nível do lago (FQ1 e FQ4) e a variações no aporte de detríticos (FQ3). No poço B, é a ocorrência de FQ1 e FQ2 que ganha destaque, padrão também detectado na cadeia de Markov e que está intimamente relacionado à processos de modificação pós-deposicional, indicando, uma relação autoconsistente entre dolomitização e silicificação.

O padrão de empilhamento 2 na Figura 35 é dominado pela ocorrência de CLU, com destaque para os que apresentam laminações irregulares a crenuladas. Este pacote pode ser associado a um período de rasamento generalizado do lago, em um cenário favorável à instalação de uma planície microbial, representando uma expressiva fase de retração. Quimicamente há, nos poços A e B, recorrência de FQ3 e FQ4, preservando a assinatura do aporte detrítico (FQ3) e a presença de FQ4 indica, mesmo que temporariamente, mudanças na salinidade ou química do sistema lacustre, possivelmente associada a incursões marinhas.

Figura 35: Comparação dos padrões litológicos e químicos observados nos três poços analisados. Da esquerda para a direita: poços A, B e C, respectivamente. Os números (1, 2 e 3) correspondem aos padrões de empilhamento observados tanto para o poço A quanto para o poço B. Para o poço C esses padrões são identificados como I, II e III.



Fonte: A autora (2026).

Vale mencionar que Luiz *et al.* (2026) interpretam para esse intervalo do poço A, a presença de halita (NaCl) nos CLU e associam a ocorrência com uma possível incursão marinha, responsável por modificar as condições de alcalinidade do lago, criando as condições químicas favoráveis ao desenvolvimento de esteiras microbianas.

Já o topo do Marco Lula nos poços A e B (padrão de empilhamento 3 na Figura 35) é caracterizado pela relação entre SPH e SHB, indicando um retorno das condições de alta alcalinidade, sem, contudo, ter lâmina d'água suficiente para a formação de CLU (com laminações regulares). Em relação as fácies químicas, tem-se um padrão semelhante ao observado na base do intervalo. No poço A, esse padrão é caracterizado apenas por FQ1, FQ3 e FQ4, relacionadas a flutuações no nível do lago, e no poço B, observa-se a intercalação de FQ1 e FQ3 e, de forma restrita de FQ2.

Apesar das similaridades entre os padrões de empilhamento dos poços A e B, verifica-se que as espessuras dos pacotes são muito distintas (Figura 35), o que ocorre como consequência de variações do nível de base, possivelmente refletindo diferenças locais de acomodação ou aporte químico, o que amplia a discussão para além da simples repetição de um modelo regional.

Com os dados disponíveis, verifica-se uma variação no nível de base, em que condições mais rasas são alcançadas na porção intermediária dos poços A e B, sendo melhor desenvolvida no poço A. Deste modo, sugere-se que a área do poço A estaria em regiões com menor lâmina d'água, possivelmente mais próximas a borda do lago ou à algum alto estrutural, com condições mais favoráveis para o desenvolvimento de esteiras microbianas. Isso é corroborado também pela maior proporção de clastos vulcânicos e grande contribuição de detríticos (FQ3) ao longo de toda a sucessão. Enquanto o poço B estaria sempre em condições um pouco mais profundas, com maior espaço de acomodação para os pacotes depositados na base e no topo e esteiras microbianas menos desenvolvidas (Figura 34).

Localizado um pouco mais afastado dos demais, o poço C (Figura 1) é o que apresenta as maiores particularidades. O poço C apresenta um padrão de empilhamento bastante distinto do observado para os poços A e B (Figura 35). No geral, tem-se um intervalo basal (padrão de empilhamento I na Figura 35) constituído essencialmente por rochas formadas *in situ*, com CLU com laminação regular, formando ciclotemas (*sensu* Wright e Barnett, 2014 e 2015). Nesse intervalo ocorrem os CRE com bioclastos, cuja origem pode estar relacionada a fases de expansão do lago, quando predominam condições mais estáveis, com menor alcalinidade e salinidade, favorável a explosão populacional dos ostracodes. A preservação de carapaças articuladas indica pouco ou nenhum retrabalhamento após a morte.

Na porção basal do poço C, observa-se o predomínio da FQ3, intercalada principalmente com FQ4, enquanto FQ1 e FQ2 ocorrem de forma subordinada, e FQ5 aparece de maneira restrita na profundidade 4.930 m. Apesar da variação textural significativa, o padrão químico da base do poço C é similar ao descrito para a base do poço A, sugerindo a presença de um sistema lacustre conectado, cuja oscilação do nível de base controla a química da água e, no poço C, a textura da rocha. Como mencionado acima, o poço A encontra-se em uma região de borda de lago ou próxima a um alto estrutural e, por isso, sujeito a maior frequência de eventos de maior energia.

No segundo padrão de empilhamento observado no poço C, identificado como II na Figura 35, é notável a recorrência de rochas retrabalhadas, com destaque para os CRU, evidenciando o momento de maior recorrência de transporte e retrabalhamento de alta energia no poço C, enquanto lateralmente, nos poços A e B ocorre a instalação de uma planície microbial. Nessa porção do poço C observa-se a intercalação de FQ1, FQ2 e FQ4, com destaque para a recorrência de FQ4, característica do padrão de empilhamento 2 dos poços A e B (Figura 34), indicando que a conectividade do sistema lacustre ainda está mantida e todos os poços exibem a assinatura química indicativa de ocorrências de incursões marinhas.

Em direção ao topo do poço C (padrão de empilhamento III na Figura 35), destaca-se a presença de CLU com laminações irregulares a crenuladas, com ocorrências de evaporitos. Essa porção possui um padrão químico bastante semelhante ao observado na porção intermediária dos poços A e B (padrão de empilhamento 2 – Figura 35), o que indicaria, assim como nesses poços o desenvolvimento de planícies microbiais, com eventos de dolomitização e silicificação, representados por FQ1 e FQ2 respectivamente, e, pontualmente, episódios de hidrotermalismo representado pela FQ5. Apesar da ausência da FQ4, a presença de níveis de evaporitos atua como um indicador de processos similares de concentração salina/ evaporação.

No poço C, essa associação pode representar um segundo ciclo de desenvolvimento das planícies microbianas, coexistindo lateralmente com o lago alcalino onde ocorre a precipitação de SPH e SHB (padrão de empilhamento 3 na Figura 35). Com isso, tem-se que as planícies microbianas não estariam restritas a um único momento da história evolutiva do Marco Lula, mas sim em diferentes momentos e intensidades ao longo da evolução do sistema lacustre.

Admite-se que as especificidades do poço C ocorrem devido ao controle estrutural da área de Iracema. Segundo Adriano *et al.* (2022), o Alto de Iracema forma um bloco único durante as fases de rifte inferior e superior, até que na fase de rifte posterior, quando se dá a deposição do Marco Lula (Figura 6), começaram a se desenvolver as falhas da Zona de Transferência de Iracema, com orientação SE – NW. O maior retrabalhamento e as incursões

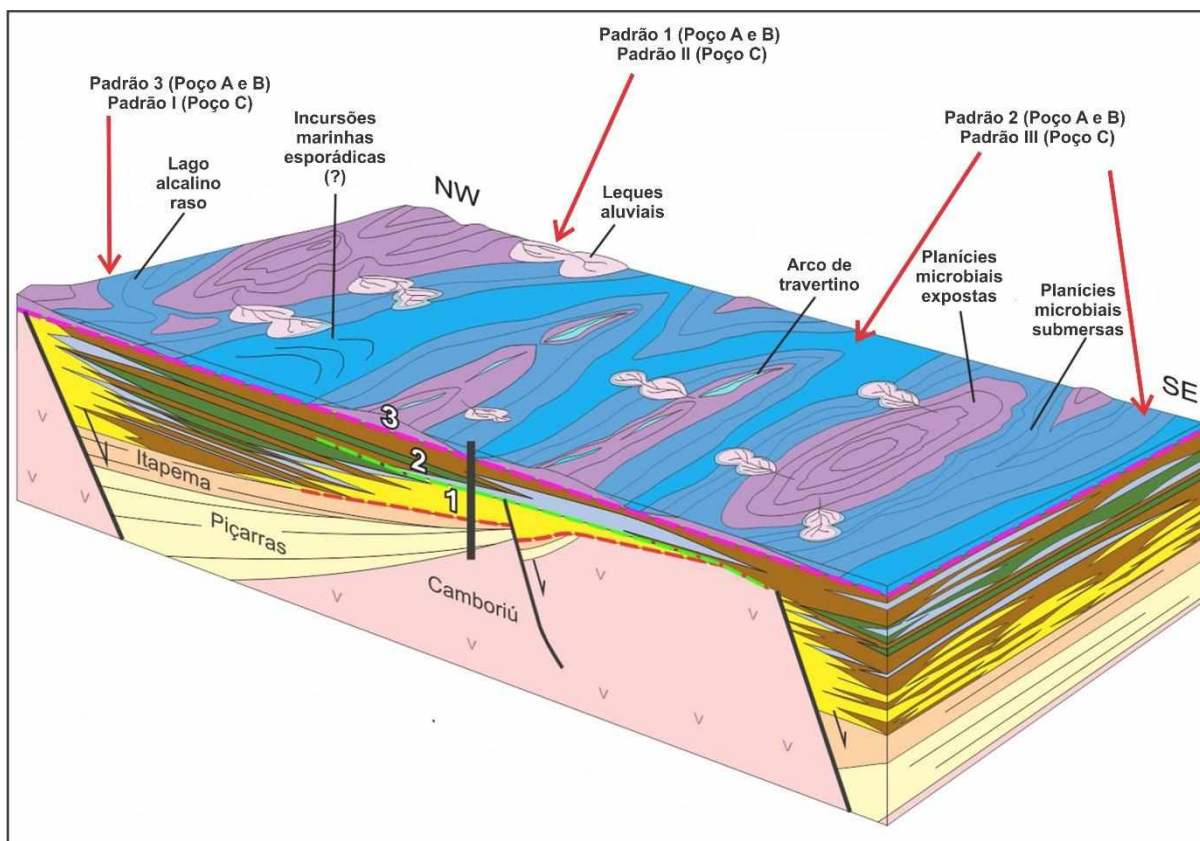
marinhas mais duradouras associadas ao padrão de empilhamento II do poço C (Figura 35) pode guardar relações com essa reestruturação tectônica no Alto de Iracema.

Considerando as variações verticais e laterais descritas e o modelo de planícies microbiais de da Silva *et al.* (2025) proposto para a fase final de deposição da Formação Barra Velha, verifica-se que o padrão 1 observado nos poços A e B estaria associado as regiões de leques aluviais que se desenvolvem em altos estruturais na borda de um extenso lago raso e alcalino (Figura 35). A sedimentação desse lago é verificada na base do poço C (padrão I), e a relação lateral com leques aluviais explica o elevado aporte de detriticos (FQ3; Figuras 35 e 36).

O padrão 2 dos poços A e B é representado pelas planícies microbiais. A ausência de evidências concretas de exposição faz com que seja indicada a deposição em planícies microbiais submersas (Figura 36) em um cenário cujas condições foram modificadas pelas incursões marinhas. As condições de deposição na área do poço C, neste momento, eram muito mais energéticas, com a formação de extensas camadas de rochas retrabalhadas (padrão II), possivelmente associada ao desenvolvimento das falhas da Zona de Transferência de Iracema (Adriano *et al.*, 2022).

Por fim, o topo dos poços A e B (padrão 3) corresponde a regiões de lago alcalino raso (Figura 36) evidenciado pela grande quantidade de SHB e SPH. Na região do poço C, tem-se o padrão III (Figura 35), relacionado ao desenvolvimento de planícies microbiais. Admite-se que este período é de menor atividade tectônica, com o desenvolvimento de lagos alcalinos rasos no Campo de Tupi e de planícies microbianas com incursões marinhas mais recorrentes no Campo de Iracema, sem evidências de eventos episódicos de alta energia.

Figura 36: Estágio final da evolução tectono-estratigráfica da Formação Barra Velha proposto por da Silva *et al.* (2025). Observa-se as formações Camboriú, Piçarras, Itapema e Barra Velha, sendo a última representada por três intervalos (1, 2 e 3). A linha vermelha tracejada indica a discordância pré-Alagoas; a linha tracejada verde a discordância intra-Alagoas; e a linha tracejada rosa a base do Marco Lula. As setas vermelhas indicam os cenários identificados neste estudo de caso.



Fonte: Adaptado de da Silva *et al.*, 2025.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A integração multitécnica e multiescala empregada neste estudo permitiu caracterizar de forma abrangente o Marco Lula, evidenciando sua significativa heterogeneidade vertical e as variações laterais observadas entre os poços analisados.

Além de contribuir para o avanço no conhecimento sobre esse intervalo estratigráfico, o estudo apresentou uma abordagem metodológica aplicada ao tratamento de bases de dados geoquímicas multivariáveis. Em um avanço frente a abordagens convencionais, o pré-processamento e processamento dos dados obtidos por FRX-p foram realizados por meio da aplicação de mapas auto-organizáveis (SOM), utilizados como ferramenta de redução de dimensionalidade, seguidos do algoritmo *k-Means* para o agrupamento dos dados. Essa abordagem permitiu preservar variações químicas, inclusive aquelas de ocorrência pontual, evitando a homogeneização artificial do conjunto de dados.

O fluxo de trabalho baseado em SOM e *k-Means* demonstrou elevada sensibilidade na identificação de padrões geoquímicos, especialmente na preservação de fácies químicas enriquecidas em elementos menores e traços. Dessa forma, a metodologia adotada mostrou-se eficaz para a análise de sistemas heterogêneos como o Marco Lula, ressaltando que a escolha das ferramentas analíticas deve considerar o nível de detalhamento geoquímico desejado e a complexidade intrínseca da sucessão estudada.

A integração entre dados litológicos e fácies químicas permitiu uma melhor compreensão acerca do controle sedimentar e composicional das anomalias de raios gama e urânio características do Marco Lula. Foram descritas para o Marco Lula litologias similares às da Formação Barra Velha (CLU, SPH, SHB, CRE e CRU), com destaque para a ocorrência de CLU com textura peloidal a grumosa e laminações irregulares e crenuladas, característicos do intervalo de estudo. Ademais, o reconhecimento de padrões de empilhamento foi essencial, pois evidencia diferenças sistemáticas entre os poços A e B e o poço C, refletindo variações laterais expressivas entre os campos de Tupi e Iracema, provavelmente relacionadas à atuação de controles tectônicos.

Do ponto de vista geoquímico, a sucessão é constituída por quatro fácies químicas comuns aos três poços (FQ1, FQ2, FQ3 e FQ4), além da ocorrência pontual de FQ5 no poço C. O predomínio de FQ1 indica níveis afetados por processos de dolomitização, enquanto FQ2 registra episódios de silicificação. A presença de FQ3 marca momentos de aumento no aporte detrítico na bacia, frequentemente associada a CLU com laminação irregular a crenulada. Já FQ4 reflete episódios de incursões marinhas, caracterizados por aumentos relativos nos teores de Na. Por fim, FQ5, exclusiva do poço C, registra eventos episódicos possivelmente associados à atividade hidrotermal.

A comparação entre os poços evidencia diferenças na organização das fácies químicas. Nos poços A e B observa-se maior intercalação entre as fácies químicas, sugerindo maior variabilidade nas condições deposicionais e menor duração relativa dos eventos. No poço C, por outro lado, essa intercalação é menos frequente, indicando maior duração dos processos responsáveis pela formação das fácies químicas identificadas.

A integração desses resultados com os modelos evolutivos propostos por da Silva *et al.* (2025) indica o predomínio de condições ambientais relativamente estáveis, favoráveis ao desenvolvimento de extensas planícies microbiais, que variavam lateralmente para ambientes de leques aluviais e lagos alcalinos rasos, cenário deposicional controlado pela atividade tectônica e, também, pela incursão de água marinha.

Nesse contexto, o presente estudo evidencia a importância da integração entre dados litológicos e químicos na caracterização de sistemas sedimentares complexos, como aqueles presentes na sucessão carbonática do pré-sal da Bacia de Santos, fornecendo um fluxo de trabalho robusto que pode ser estendido a outros intervalos complexos da seção pré-sal.

Os resultados obtidos contribuem para o aprimoramento da interpretação da evolução deposicional do Marco Lula e para o reconhecimento dos principais processos diagenéticos que atuaram na modificação pós-deposicional dessas rochas.

REFERÊNCIAS

- ADRIANO, M. S.; FIGUEIREDO, J. P.; COELHO, P. H. G. R.; BORGHI, L. Tectonic and stratigraphic evolution of the Santos Basin rift phase: new insights from seismic interpretation on Tupi oil field area. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 116, p. 103842, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2022.103842>
- ARAÚJO, M. N. C. de; RIGOTI, C. A.; ROMEIRO, M. A. T.; VIANA, A. R.; SZATMARI, P. Evolução tectônica da margem rifteada sudeste do Brasil – do Gondwana ao Atlântico Sul. In: PINHEIRO CHAGAS, A. A.; ARAÚJO, C. C. de; SANTOS, L. A. (org.). *As grandes descobertas do pré-sal no Atlântico Sul*. Rio de Janeiro: Universidade Petrobras, 2024. p. 239–323.
- AZERÊDO, A. C.; DUARTE, L. V.; SILVA, A. P. The challenging carbonates from the pre-salt reservoirs offshore Brazil: facies, palaeoenvironment and diagenesis. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 108, art. 103202, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2021.103202>
- BARNETT, A. J.; OBERMAIER, M.; AMTHOR, J.; SHARAFODIN, M.; BOLTON, M.; CLARKE, D.; CAMARA, R. Origin and significance of thick carbonate grainstone packages in nonmarine successions: a case study from the Barra Velha Formation, Santos Basin, Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2021.105081>
- BASSO, M.; BELILA, A. M. P.; CHINELATTO, G. F.; SOUZA, J. P. D. P.; VIDAL, A. C. Sedimentology and petrophysical analysis of pre-salt lacustrine carbonate reservoir from the Santos Basin, southeast Brazil. *International Journal of Earth Sciences*, v. 110, p. 2573–2595, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00531-020-01932-7>
- BELL, K. G. Uranium in carbonate rocks. U.S. Geological Survey Professional Paper, n. 474-A, p. A1–A29, 1963. DOI: 10.3133/pp474A.
- BORGHI, L.; DA SILVA, M. C. A. S.; FAVORETO, J.; SANTOS, J. Defining a new common language: a multi-scale classification for the pre-salt carbonates of the Barra Velha Formation. In: *Proceedings of the Rio Oil e Gas Expo and Conference*, Rio de Janeiro, 2022. DOI: <https://doi.org/10.48072/2525-7579.rog.2022.026>
- BUCKLEY, J. P.; BOSENCE, D.; ELDERS, C. Tectonic setting and stratigraphic architecture of an Early Cretaceous lacustrine carbonate platform, Sugar Loaf High, Santos Basin, Brazil. *Geological Society, London, Special Publications*, v. 418, n. 1, p. 175–191, 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1144/sp418.13>
- CALDAS, M. F.; ZALÁN, P. V. Reconstituição cinemática e tectono-sedimentação associada a domos salinos nas águas profundas da Bacia de Santos, Brasil. *Boletim de Geociências da Petrobras*, v. 17, n. 2, p. 227–248, 2009.
- CARRAMAL, N. G.; OLIVEIRA, D. M.; CACELA, A. S. M.; CUGLIERI, M. A. A.; ROCHA, N. P.; VIANA, S. M.; TOLEDO, S. L. V.; PEDRINHA, S.; DE ROS, L. F. Paleoenvironmental insights from the deposition and diagenesis of Aptian pre-salt magnesium silicates from the Lula Field, Santos Basin, Brazil. *Journal of Sedimentary Research*, v. 92, n. 1, p. 12–31, 2022. DOI: <https://doi.org/10.2110/jsr.2020.139>

- CARMINATTI, M.; WOLFF, B.; GAMBOA, L. New exploratory frontiers in Brazil. In: WORLD PETROLEUM CONGRESS, 19., 2008. Proceedings. [S.l.]: World Petroleum Council, 2008. p. WPC-19-2802.
- CARVALHO, A. M. A.; HAMON, Y.; SOUZA JR., O. G. de; CARRAMAL, N. G.; COLLARD, N. Facies and diagenesis distribution in an Aptian pre-salt carbonate reservoir of the Santos Basin, offshore Brazil: a comprehensive quantitative approach. *Marine and Petroleum Geology*, v. 141, p. 105708, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2022.105708>
- CARVALHO, M. D.; FERNANDES, F. L.; MELLO, M. R.; YILMAZ, P. O.; KATZ, B. J. The supergiant Lower Cretaceous pre-salt petroleum systems of the Santos Basin, Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, v. 124, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104779>
- CHABOUREAU, A. C.; GUILLOCHEAU, F.; ROBIN, C.; ROHAIS, S.; MOULIN, M.; ASLANIAN, D. Paleogeographic evolution of the central segment of the South Atlantic during Early Cretaceous times: paleotopographic and geodynamic implications. *Tectonophysics*, v. 604, p. 191–223, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tecto.2012.08.025>
- CHAFETZ, H.; BARTH, J.; COOK, M.; GUO, X.; ZHOU, J. Origins of carbonate spherulites: implications for Brazilian Aptian pre-salt reservoir. *Sedimentary Geology*, v. 365, p. 21–33, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2017.12.024>
- CHANG, H. K.; ASSINE, M. L.; CORRÊA, F. S.; TINEN, J. S.; VIDAL, A. C.; KOIKE, L. Sistemas petrolíferos e modelos de acumulação de hidrocarbonetos na Bacia de Santos. *Revista Brasileira de Geociências*, v. 38, n. 2, supl., p. 29–46, 2008.
- CHERKASSKY, V.; MULIER, F. Learning from data: concepts, theory, and methods. New York: John Wiley & Sons, 1998.
- CHINELATTO, G. F.; BELILA, A. M. P.; BASSO, M.; SOUZA, J. P. P.; VIDAL, A. C. A taphofacies interpretation of shell concentrations and their relationship with petrophysics: a case study of Barremian–Aptian coquinas in the Itapema Formation, Santos Basin, Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, v. 116, p. 104317, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104317>
- CLAES, H.; ERTHAL, M. M.; SOETE, J.; ÖZKUL, M.; SWENNEN, R. Shrub and pore type classification: petrography of travertine shrubs from the Ballık-Belevi area (Denizli, SW Turkey). *Quaternary International*, v. 437, p. 147–163, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.quaint.2016.11.002>
- DAVISON, I.; ANDERSON, L.; NUTTALL, P. Salt deposition, loading and gravity drainage in the Campos and Santos salt basins. Geological Society, London, Special Publications, v. 363, n. 1, p. 159–174, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP363.8>
- DA SILVA, D. R. L.; TERRA, S. A.; RIBEIRO, A.; BORGHI, L. A three stage tectono-stratigraphic evolution of a Pre-salt rift unit: Barra Velha Formation (Aptian) in the Tupi Oil Field, Santos Basin, Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 155, p. 105380, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2025.105380>

- DEHLER, N. M.; YAMATO, A. A.; CRUZ, F. E. G.; MORETTI JÚNIOR, P. A.; LOPES, M. R. F.; ZAMBONATO, E. E.; VASCONCELOS, C. S.; OLIVEIRA, J. A. B.; GOMES, L. C.; NOGUEIRA, M. S.; HAMSI JÚNIOR, G. P.; FREITAS, J. T. R. Tectônica e sedimentação do Pré-sal da Bacia de Santos. In: CHAGAS, A. A. P.; ARAUJO, C. C.; SANTOS, L. A. (org.). As grandes descobertas do Pré-sal no Atlântico Sul. Rio de Janeiro: Petrobras, 2024. p. 1089.
- DE ROS, L. F.; OLIVEIRA, D. M. An operational classification system for the South Atlantic pre-salt rocks. *Journal of Sedimentary Research*, v. 93, n. 10, p. 693–704, 2023. DOI: <https://doi.org/10.2110/jsr.2022.103>
- DIAS, J. L. Tectonic, stratigraphy and sedimentation during the Aptian along the Brazilian eastern margin; Tectônica, estratigrafia e sedimentação no Andar Aptiano da margem leste brasileira. *Boletim de Geociências da Petrobras*, v. 13, p. 1-23, 2005.
- DIAS, J. L. Análise sedimentológica e estratigráfica do andar Aptiano em parte da margem leste do Brasil e no Platô das Malvinas: considerações sobre as primeiras incursões e ingressões marinhas do oceano Atlântico Sul meridional. 1988. 222 f. Tese (Doutorado em Geociências) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1988.
- DOS SANTOS, L. L.; PLANTZ, J. B.; FERREIRA, L. D. O.; SANTOS, J.; DOS SANTOS, H. N.; BORGHI, L. Optimizing analysis and interpretation of portable XRF data: a case study in the pre-salt Santos Basin, Brazil. *Earth Science Informatics*, v. 18, n. 3, p. 478, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12145-025-01977-9>
- DUNHAM, R. J. Classification of carbonate rocks according to depositional texture. 1962.
- EMBRY, A. F.; KLOVAN, J. E. A late Devonian reef tract on northeastern Banks Island, NWT. *Bulletin of Canadian Petroleum Geology*, v. 19, n. 4, p. 730-781, 1971.
- ERTHAL, M. M.; CAPEZZUOLI, E.; MANCINI, A.; CLAES, H.; SOETE, J.; SWENNEN, R. Shrub morpho-types as indicator for the water flow energy – Tivoli travertine case (Central Italy). *Sedimentary Geology*, v. 357, p. 79–99, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2016.11.008>
- EUGSTER, H. P.; HARDIE, L. A. Sedimentation in an ancient playa-lake complex: the Wilkins Peak Member of the Green River Formation of Wyoming. *Geological Society of America Bulletin*, v. 86, n. 3, p. 319–335, 1975. DOI: [https://doi.org/10.1130/0016-7606\(1975\)86%3C319:SIAAPC%3E2.0.CO;2](https://doi.org/10.1130/0016-7606(1975)86%3C319:SIAAPC%3E2.0.CO;2)
- FARIAS, F.; SZATMARI, P.; BAHNIUK, A. M.; FRANÇA, A. B. Evaporitic carbonates in the pre-salt of Santos Basin: genesis and tectonic implications. *Marine and Petroleum Geology*, v. 105, p. 251–272, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2019.04.020>
- FERREIRA, L. O.; ARENA, M. C.; NOBRE-LOPES, J.; JESUS, B. M.; PLANTZ, J.; BORGHI, L. Contrasting abiotic and biotic processes in the Upper Barra Velha Formation at Iracema Field (Pre-salt, Santos Basin). In: AAPG International Conference and Exhibition 2025, 2025, Rio de Janeiro. Abstracts... Rio de Janeiro: American
- FIGUEIREDO, I.; LANA, C.; ALKMIM, F. F.; SILVA, M. A.; SOUZA, M. E. S.; DIAS-FILHO, D. C.; MENDONÇA, K. R. Tracing carbonate diagenesis and hydrothermal

- activity during the opening of the Central South Atlantic: insights from the Santos Basin (Brazil). *Geoscience Frontiers*, 2025. Art. 102115. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.gsf.2025.102115>
- FREITAS, V. A. de; VITAL, J. C. dos S.; RODRIGUES, B. R.; RODRIGUES, R. Source rock potential, main depocenters, and CO₂ occurrence in the pre-salt section of Santos Basin, southeast Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 115, art. 103760, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2022.103760>
- GEISLER, T.; PIDGEON, R. T.; VAN BRONSWIJK, W.; KURTZ, R. Transport of uranium, thorium, and lead in metamict zircon under low-temperature hydrothermal conditions. *Chemical Geology*, v. 191, n. 1–3, p. 141–154, 2002. DOI: 10.1016/S0009-2541(02)00153-5.
- GIERLOWSKI-KORDESCH, E. H. Lacustrine carbonates. *Developments in Sedimentology*, v. 61, p. 1–101, 2010.
- GINGERICH, P. D. Markov analysis of cyclic alluvial sediments. *Journal of Sedimentary Research*, v. 39, n. 1, p. 330–332, 1969. DOI: <https://doi.org/10.1306/74D71C4E-2B21-11D7-8648000102C1865D>
- GOMES, J. P.; BUNEVICH, R. B.; TEDESCHI, L. R.; TUCKER, M. E.; WHITAKER, F. F. Facies classification and patterns of lacustrine carbonate deposition of the Barra Velha Formation, Santos Basin, Brazilian pre-salt. *Marine and Petroleum Geology*, v. 113, art. 104176, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2019.104176>
- GONZAGA, H. M.; NOVO, T. A.; DA SILVA, J. T. G.; BOA, T. M. R. F.; GONÇALVES, L. C.; CORDEIRO, M. S. Stratigraphy and drilling geomechanics of a thick salt section: the Ariri Formation in the eastern portion of the Santos Basin. *Journal of South American Earth Sciences*, 2024. Art. 104802. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2024.104802>
- GUIMARÃES, S. P.; ARTAGÃO, V. M.; MOREIRA, T. P. B.; SANTOS, B. T.; MUNIZ DA CRUZ, N. M. S. da C.; CRUZ, J. M. N.; CORTES, V. H. O Campo de Tupi. In: PINHEIRO CHAGAS, A. A.; ARAÚJO, C. C. de; SANTOS, L. A. (org.). *As grandes descobertas do pré-sal no Atlântico Sul*. Rio de Janeiro: Universidade Petrobras, 2024. p. 853–883.
- HERLINGER JR., R.; ZAMBONATO, E. E.; DE ROS, L. F. Influence of diagenesis on the quality of Lower Cretaceous pre-salt lacustrine carbonate reservoirs from northern Campos Basin, offshore Brazil. *Journal of Sedimentary Research*, v. 87, n. 12, p. 1285–1313, 2017. DOI: <https://doi.org/10.2110/jsr.2017.70>
- KARNER, G. D.; GAMBÔA, L. A. P. Timing and origin of the South Atlantic pre-salt sag basins and their capping evaporites. In: SCHREIBER, B. C.; LUGLI, S.; BABEL, M. (eds.). *Evaporites through space and time*. London: Geological Society of London, 2007. (Geological Society, London, Special Publications, v. 285, n. 1), p. 15–35. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP285.2>
- KLAJA, J.; DUDEK, L. Geological interpretation of spectral gamma ray (SGR) logging in selected boreholes. *Nafta-Gaz*, v. 72, n. 1, p. 3–14, 2016. DOI: 10.18668/NG2016.01.01

- KNORR, E. M. Outliers and data mining: finding exceptions in data. 2002. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) – University of British Columbia, Vancouver, 2002.
- KODIKARA, G. R.; MCHENRY, L. J.; STANISTREET, I. G.; STOLLHOFEN, H.; NJAU, J. K.; TOTH, N.; SCHICK, K. Wide & deep learning for predicting relative mineral compositions of sediment cores solely based on XRF scans, a case study from Pleistocene Paleolake Olduvai, Tanzania. *Artificial Intelligence in Geosciences*, v. 5, p. 100088, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aiig.2024.100088>
- KOHONEN, T. Essentials of the self-organizing map. *Neural Networks*, v. 37, p. 52–65, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2012.09.018>
- LEHN, I.; VASCONCELOS, C. de O. The role of organic matter in Brazilian Pre-Salt carbonates. *Depositional Record*, v. 11, n. 1, p. 403–417, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1002/dep2.311>
- LIMA, B. E. M.; DE ROS, L. F. Deposition, diagenetic and hydrothermal processes in the Aptian pre-salt lacustrine carbonate reservoirs of the northern Campos Basin, offshore Brazil. *Sedimentary Geology*, v. 383, p. 55–81, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2019.01.006>
- LIU, Y.; WEISBERG, R. H.; MOOERS, C. N. K. Performance evaluation of the self-organizing map for feature extraction. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, v. 111, n. C5, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1029/2005JC003117>
- LICEN, S.; ASTEL, A.; TSAKOVSKI, S. Self-organizing map algorithm for assessing spatial and temporal patterns of pollutants in environmental compartments: a review. *Science of the Total Environment*, v. 878, art. 163084, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.163084>
- LUIZ, I. G.; PLANTZ, J. B.; DÍAZ, N.; DOS SANTOS, H. N.; SANTOS, J.; BORGHI, L. High-resolution geochemical characterization of pre-salt carbonates using micro-XRF: insights from Lula's Fingers, Santos Basin (Brazil). *Marine Geoscience and Energy Resources*, 2026. Art. 207722. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marger.2026.207722>
- MEDEIROS, R. S. P.; BASSO, M.; CHINELATTO, G. F.; SOARES, M. V. T.; MATHEUS, G. F.; MORALES, J. F. V.; VIDAL, A. C. Unravelling the origin of reworked deposits in Aptian lacustrine carbonate reservoirs of the Santos Basin, SE Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, v. 161, art. 106700, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2024.106700>
- MINZONI, M.; CANTELLI, A.; THORNTON, J.; WIGNALL, B. Seismic-scale geometries and sequence-stratigraphic architecture of Early Cretaceous syn-post rift carbonate systems, presalt section, Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP509-2019-78>
- MOULIN, M.; ASLANIAN, D.; RABINEAU, M.; PATRIAT, M.; MATIAS, L. Kinematic keys of the Santos–Namibe basins. In: MOHRIAK, W. U. *et al.* (eds.). *Conjugate divergent margins*. Geological Society, London: Geological Society of London, 2013. (Special Publications, v. 369), p. 91–107. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP369.3>

- MOREIRA, J. L. P.; MADEIRA, C. V.; GIL, J. A.; MACHADO, M. A. P. Bacia de Santos. *Boletim de Geociências da PETROBRAS*, v. 15, n. 2, p. 531–549, 2007.
- MORAES, M. F. B.; VIANA, A. R.; JAHNERT, R. J.; MACHADO, M. A. P.; CHAGAS, A. A. P. O Pré-sal nas bacias de Campos e Santos: como tudo começou. In: PINHEIRO CHAGAS, A. A.; ARAÚJO, C. C. de; SANTOS, L. A. (org.). *As grandes descobertas do pré-sal no Atlântico Sul*. Rio de Janeiro: Universidade Petrobras, 2024. p. 17–56.
- MUNIZ, M. C.; BOSENCE, D. W. J. Pre-salt microbialites from the Campos Basin (offshore Brazil): image log facies, facies model and cyclicity in lacustrine carbonates. *Marine and Petroleum Geology*, v. 65, p. 62–81, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1144/sp418.10>
- NEMEC, W.; STEEL, R. Alluvial and coastal conglomerates: their significant features and some comments on gravelly mass-flow deposits. [S.l.: s.n.], 1984.
- PARSONS, C.; GRABULOSA, E. M.; PILI, E.; FLOOR, G. H.; ROMAN-ROSS, G.; CHARLET, L. Quantification of trace arsenic in soils by field-portable X-ray fluorescence spectrometry: considerations for sample preparation and measurement conditions. *Journal of Hazardous Materials*, v. 262, p. 1213–1222, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2012.07.001>
- PERON-PINVIDIC, G.; MANATSCHAL, G.; OSMUNDSEN, P. T. Structural comparison of archetypal Atlantic rifted margins: a review of observations and concepts. *Marine and Petroleum Geology*, v. 43, p. 21–47, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2013.02.002>
- PEREIRA, T. P.; TERRA, S.; SILVA, D. R. da; PIRES, G. L. C.; RIBEIRO, A. Distribution of silicification intervals throughout the Barra Velha and Itapema formations: host rock controls and chronology of silica precipitation (Pre-Salt, Santos Basin, Brazil). *Journal of South American Earth Sciences*, v. 128, 104446, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2023.104446>
- PEREIRA, M. J.; FEIJÓ, F. J. Bacia de Santos. *Boletim de Geociências da PETROBRAS*, v. 8, n. 1, p. 219-235, 1994.
- PETROBRAS. Glossário único Petrobras. Disponível em: <http://glossario.petrobras.com.br/glsu/termo/start.do?consulta=pré-saletipo=BASICepage=1>>. Acesso em: 28 ago. 2025.
- PIETZSCH, R.; TEDESCHI, L. R.; OLIVEIRA, D. M.; ANJOS, C. W. D. dos; VAZQUEZ, J. C.; FIGUEIREDO, M. F. Environmental conditions of deposition of the Lower Cretaceous lacustrine carbonates of the Barra Velha Formation, Santos Basin (Brazil), based on stable carbon and oxygen isotopes: a continental record of pCO₂ during the onset of the Oceanic Anoxic Event 1a (OAE 1a) interval. *Chemical Geology*, v. 535, art. 119457, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2019.119457>
- PIETZSCH, R.; OLIVEIRA, D. M.; TEDESCHI, L. R.; NETO, J. V. Q.; FIGUEIREDO, M. F.; VAZQUEZ, J. C.; SOUZA, R. S. de. Palaeohydrology of the Lower Cretaceous pre-salt lacustrine system, from rift to post-rift phase, Santos Basin, Brazil. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, v. 507, p. 60–80, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.palaeo.2018.06.043>

- PLANTZ, J. B.; RAITZ JR., G.; SANTOS, J.; SANTOS, H. N. dos; BORGHI, L. Unsupervised learning to understand patterns in gamma ray logs and uranium anomalies in the pre-salt reservoirs of the Santos Basin, Brazil. *Marine and Petroleum Geology*, 2025. Art. 107308. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2025.107308>
- PLANTZ, J. B.; RAITZ JR., G.; SANTOS, J.; SANTOS, H. N. dos; BORGHI, L. Depositional and diagenetic characteristics of the Lula's Fingers: evidences of microbial activity and exposure during final pre-salt deposition in Santos Basin. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 135, art. 104731, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2023.104731>.
- PLANTZ, J. B.; BORGHI, L. Unsupervised learning for identifying silicified and dolomitized zones in pre-salt using portable XRF data. *Journal of South American Earth Sciences*, v. 128, p. 104421, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsames.2023.104421>
- PRÉ-SAL PETRÓLEO S.A. (PPSA). *O setor de E&P no Brasil*. Brasília: PPSA, 2024. Disponível em: https://www.presalpetroleo.gov.br/wpcontent/uploads/2025/04/Live_Uni_RIO_PPSA.pdf. Acesso em: 7 mar. 2026.
- READ, W. A. Analysis and simulation of Namurian sediments in Central Scotland, using a Markov-process model. *Mathematical Geology*, v. 1, n. 3, p. 199–219, 1969. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02047412>.
- REBELO, T. B.; BATEZELLI, A.; MATTOS, N. H. S.; LEITE, E. P. Flow units in complex carbonate reservoirs: a study case of the Brazilian pre-salt. *Marine and Petroleum Geology*, v. 140, art. 105639, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2022.105639>
- SALLER, A.; RUSHTON, S.; BUAMBUA, L.; INMAN, K.; MCNEIL, R.; DICKSON, J. A. D. Presalt stratigraphy and depositional systems in the Kwanza Basin, offshore Angola. *AAPG Bulletin*, v. 100, n. 7, p. 1135–1164, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1306/02111615216>
- SANABRIA, L. L. O. Geoquímica orgânica e isotópica das formações: Piçarras, Itapema e Barra Velha no campo de Lula, Bacia de Santos. 2022. Tese (Doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2022.
- SARTORATO, A. C. L.; TONETTO, S. N.; PEREIRA, E. Silicification and dissolution features in the Brazilian Pre-Salt Barra Velha Formation: impacts in the reservoir quality and insights for 3D geological modeling. In: *RIO OIL & GAS EXPO AND CONFERENCE*, 2020, Rio de Janeiro. Proceedings... Rio de Janeiro: Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás (IBP), 2020. p. 1–3. DOI: <https://doi.org/10.48072/2525-7579.rog.2020.068> .
- SELLEY, R. C. *Ancient sedimentary environments: a brief survey*. London: Chapman and Hall, 1970. 237 p.
- SELLEY, R. C. Facies profiles and other new methods of graphic data presentation: application in a quantitative study of Lybian tertiary shorelines deposits. *Journal of Sedimentary Petrology*, v. 38, p. 363–372, 1968. DOI: <https://doi.org/10.1306/74D71992-2B21-11D7-8648000102C1865D>

- SHUTAYWI, M.; KACHOUIE, N. N. Silhouette analysis for performance evaluation in machine learning with applications to clustering. *Entropy*, v. 23, n. 6, p. 759, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/e23060759>
- SOUTO, J. S. O. Caracterização do Marco Lula. In: SEDEST – SIMPOSIO DE ESTRATIGRAFIA E SEDIMENTOLOGIA DA PETROBRAS, 5., 2010, Aracajú. Resumos [...]. Rio de Janeiro: PETROBRAS, 2010. p. 60-61.
- SOUZA, L. S.; SGARBI, G. N. C. Bacia de Santos no Brasil: geologia, exploração e produção de petróleo e gás natural. *Boletín de Geología*, v. 41, n. 1, p. 175–195, 2019. DOI: <https://doi.org/10.18273/revbol.v41n1-2019009>
- SPIRAKIS, C. S. The roles of organic matter in the formation of uranium deposits in sedimentary rocks. *Ore Geology Reviews*, v. 11, n. 1–3, p. 53–69, 1996. [https://doi.org/10.1016/0169-1368\(95\)00015-1](https://doi.org/10.1016/0169-1368(95)00015-1).
- SPÖTL, C.; PITMAN, J. K. Saddle (baroque) dolomite in carbonates and sandstones: a reappraisal of a burial-diagenetic concept. In: MORAD, S. (ed.). *Carbonate cementation in sandstones*. Oxford: Blackwell Science, 1998. p. 437–460. (International Association of Sedimentologists Special Publication, 26).
- STERK, R.; GAZLEY, M. F.; WOOD, M. P.; COLLINS, K. S.; COLLIS, G. Maximising the value of portable XRF data in exploration: an example from Marirongoe, Mozambique. *Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis*, 2018. DOI: [10.1144/geochem2017-037](https://doi.org/10.1144/geochem2017-037).
- TEDESCHI, L. Lower Cretaceous climate records and the correlation between marine and lacustrine settings (Europe and South America). 2017. Tese de Doutorado – University of Oxford, Oxford, 2017.
- TERRA, G. J. S.; SPADINI, A. R.; FRANÇA, A. B.; SOMBRA, C. L.; ZAMBONATO, E. E.; JUSCHAKS, L. C. da S.; WINTER, W. R. Classificação de rochas carbonáticas aplicável às bacias sedimentares brasileiras. *Boletim de Geociências da Petrobras*, v. 18, n. 1, p. 9–29, 2010. DOI: <https://doi.org/10.70369/1vwylg06>
- TORSVIK, T. H.; ROUSSE, S.; LABAILS, C.; SMETHURST, M. A. A new scheme for the opening of the South Atlantic Ocean and the dissection of an Aptian salt basin. *Geophysical Journal International*, v. 177, n. 3, p. 1315–1333, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2009.04137.x>
- TOSCA, N. J.; WRIGHT, V. P. Diagenetic pathways linked to labile Mg-clays in lacustrine carbonate reservoirs: a model for the origin of secondary porosity in the Cretaceous pre-salt Barra Velha Formation, offshore Brazil. *Geological Society, London, Special Publications*, v. 435, n. 1, p. 33–46, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP435.1>
- WATAHE, P.; PIRES, G.; DAL'BÓ, P.; MENEZES, M.; ARENA, M.; BORGHI, L. Mechanisms and controls of silicification in continental carbonates of the Barra Velha and Itapema formations (Aptian of Santos Basin, Brazil). *Brazilian Journal of Geology*, v. 55, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1590/2317-4889e20250042>

- WALKER, R. G. Facies and facies models: general introduction. In: WALKER, R. G. (ed.). Facies models: response to sea level change. 2. ed. St. John's: Geological Association of Canada, 1979. p. 1–7.
- WELTJE, G. J.; TJALLINGII, R. Calibration of XRF core scanners for quantitative geochemical logging of sediment cores: theory and application. *Earth and Planetary Science Letters*, v. 274, p. 423–438, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2008.07.054>
- WRIGHT, V. P. The mantle, CO₂ and the giant Aptian chemogenic lacustrine carbonate factory of the South Atlantic: some carbonates are made, not born. *Sedimentology*, v. 69, n. 1, p. 47–73, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1111/sed.12835>
- WRIGHT, P.; RODRIGUEZ, K. Reinterpreting the South Atlantic pre-salt ‘microbialite’ reservoirs: petrographic, isotopic and seismic evidence for a shallow evaporitic lake depositional model. *First Break*, v. 36, n. 5, p. 71–77, 2018. DOI: <https://doi.org/10.3997/1365-2397.n0094>
- WRIGHT, V. P.; BARNETT, A. J. The textural evolution and ghost matrices of the Cretaceous Barra Velha Formation carbonates from the Santos Basin, offshore Brazil. *Facies*, v. 66, n. 1, p. 1–18, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10347-019-0591-2>
- WRIGHT, V. P.; BARNETT, A. J. An abiotic model for the development of textures in some South Atlantic Early Cretaceous lacustrine carbonates. In: BOSENCE, D. W. J. *et al.* (eds.). *Microbial carbonates in space and time: implications for global exploration and production*. London: Geological Society, 2015. (Geological Society, London, Special Publications, v. 418), p. 209–219. DOI: <https://doi.org/10.1144/SP418.3>
- WRIGHT, V. P.; BARNETT, A. Cyclicity and carbonate-silicate gel interactions in Cretaceous alkaline lakes. *AAPG Search and Discovery Article*, n. 51011, p. 6–9, 2014.
- XU, H.; MACCARTHY, I. A. J. Markov chain analysis of vertical facies sequences using a computer software package (SAVFS): Courtmacsherry Formation (Tournaisian), Southern Ireland. *Computers & Geosciences*, v. 24, n. 2, p. 131–139, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0098-3004\(97\)00086-1](https://doi.org/10.1016/S0098-3004(97)00086-1).
- YANG, Y.; FANG, X.; LI, M.; GALY, A.; KOUTSENDENDRIS, A.; ZHANG, W. Palaeoenvironmental implications of uranium concentrations in lacustrine calcareous clastic-evaporite deposits in the western Qaidam Basin. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, v. 417, p. 422–431, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.palaeo.2014.10.002>.
- ZALÁN, P. V.; SEVERINO, M. C. G.; MAGNAVITA, L. P.; RIGOTI, C.; OLIVEIRA, J. A. B.; VIANA, A. R. Crustal architecture and evolution of rift during the breakup of Gondwana in southeastern Brazil – Santos, Campos and Espírito Santo basins. In: GONDWANA 14: REUNITING GONDWANA THE EAST MEETS WEST, 2011, Búzios. *Book of Abstracts*. Búzios, 2011. p. 26.
- ZAVALA, C. Hyperpycnal (over density) flows and deposits. *Journal of Palaeogeography*, v. 9, art. 17, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1186/s42501-020-00065-x>

ZUO, G.; WANG, H.; FAN, G.; ZHANG, J.; ZHANG, Y.; WANG, C.; YANG, L.; DING, L.; PANG, X.; ZUO, Y. Geochemical characteristics and distribution of the subsalt source rocks in the Santos Basin, Brazil. *ACS Omega*, v. 7, n. 29, p. 25715-25725, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c03018>.