



Modelagem Hidrogeoquímica

Professor: Leonardo Guimarães

Carga horária: 40h

Objetivo:

Este curso tem como objetivo principal dar aos alunos as noções básicas de geoquímica das soluções aquosas e usar ferramentas numéricas disponíveis para o tratamento de problemas geoquímicos em aplicações das engenharias de petróleo e meio ambiente.

Tópicos:

1. Introdução à Termodinâmica

Variáveis básicas.

Propriedades termodinâmicas das soluções: estado padrão e potencial químico.

Equilíbrio químico: minimização da energia livre de Gibbs, constantes de equilíbrio de uma reação química, variação com a pressão e a temperatura.

Bases de dados: PHREEQC e EQ3NR.

2. Soluções Aquosas

Estrutura de uma solução aquosa. Força iônica. Atividade da água. Atividade do soluto.

Modelos para o cálculo do coeficiente de atividade.

Soluções diluídas. Soluções Concentradas.

3. Reações Químicas

Formação de complexos aquosos: a importância do cálculo da força iônica.

Reações do tipo ácido/base: acidez e alcalinidade. Sistema carbonato. Controle do pH.

Dissolução/precipitação de minerais: equilíbrio do sistema água-mineral-gás.

4. Transporte Reativo:

Acoplamento do transporte com as reações químicas. Mecanismos de transporte: advecção, difusão e dispersão. Cinética versus equilíbrio.

5. Tópicos avançados (caráter informativo):

Acoplamento do transporte reativo com o problema de fluxo (acoplamento hidro-químico): variação de porosidade e permeabilidade pela precipitação/dissolução de minerais.

Acoplamento hidro-químico-mecânico: mecanismos de fragilização da matriz porosa (*waterweakening*).



Bibliografia:

Anderson G. M. & Crerar D. A.
Thermodynamics in Geochemistry
Oxford Univ. Press, Oxford, 1993, 588pp

Appelo C. A. J. & Postma D.
Geochemistry, Groundwater and Pollution
Balkema, Rotterdam, 1994, 536 pp.

Bethke C. M.
Geochemical Reaction Modeling
Oxford University Press, 1996, 397 pp.

Castellan G.W.
Physical Chemistry
Addison-Wesley Publishing Company, 1983, 943 pp.

Guimarães, L. do N., Gens, A. & Olivella, S.
Coupled thermo-hydro-mechanical and chemical analysis of expansive clay subjected to heating and hydration, Transport in porous media, 66, (2007), 341-372

Nordstrom D. K. & Munoz J. L.
Geochemical Thermodynamics
The Benjamin/Cummings Pub. Co., Menlo Park, 1985, 477pp.