



Guia docent 250826 - 250826 - Transport Reactiu

Última modificació: 07/10/2020

Unitat responsable: Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Camins, Canals i Ports de Barcelona

Unitat que imparteix: 751 - DECA - Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental.

Titulació: MÀSTER UNIVERSITARI EN ENGINYERIA DEL TERRENY (Pla 2015). (Assignatura optativa).

Curs: 2020

Crèdits ECTS: 5.0

Idiomes: Castellà, Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: MAARTEN WILLEM SAALTINK

Altres: ARNAU CANELLES GARCIA, MAARTEN WILLEM SAALTINK, FRANCISCO JAVIER SANCHEZ VILA

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:

13310. Interpretar assajos de laboratori i observacions de camp per identificar els mecanismes responsables de la resposta del terreny. Planificar programes d'experimentació en el laboratori.

13311. Formular i programar models numèrics Elements Finites i Diferències Finites per analitzar els processos que regeixen la resposta del terreny, interpretar la informació de camp i predir la resposta del terreny.

Genèriques:

13300. Aplicar coneixements de ciències i tecnologia avançada a la pràctica professional o investigadora de l'Enginyeria del Terreny.

13301. Dirigir, coordinar i desenvolupar projectes complerts al camp de l'Enginyeria del Terreny

13302. Identificar i dissenyar sol·lucions pels problemes de l'Enginyeria del Terreny en un marc ètic, social, econòmic i legislatiu.

13303. Avaluar l'impacte de l'Enginyeria del Terreny en el medi ambient, el desenvolupament sostenible de la societat i la importància de treballar en un entorn professional responsable.

13304. Incorporar noves tecnologies i eines avançades de l'Enginyeria del Terreny en les seves activitats professionals o investigadores.

13305. Conceptualitzar l'Enginyeria del Terreny com un camp multidisciplinar que demana incloure aspectes rellevants de geologia, sismologia, hidrogeologia, enginyeria geotècnica i sísmica, geomecànica, física de medis porosos, geofísica, geomàtica, riscos naturals, energia i interacció amb el clima.

13306. Innovar en el plantejament de metodologies, anàlisis i solucions en problemes d'Enginyeria del Terreny.

13307. Abordar i resoldre problemes matemàtics avançats d'Enginyeria des del plantejament del problema fins al desenvolupament de la formulació i la seva implementació en un programa d'ordinador. En particular, formular, programar i aplicar models analítics i numèrics avançats de càlcul al projecte, planificar i gestionar, així com interpretar els resultats obtinguts en el context de l'Enginyeria del Terreny i l'Enginyeria de Mines.

METODOLOGIES DOCENTS

The course consists of theoretical classes, exercises that are made at home and then explained in class, laboratory with computer codes and an assignment that each student has to do.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Conceptualitzar els sòls i les roques com medis porosos regits per conceptes de Mecànica de Sòlids i Fluids.
 Interpretar assajos de laboratori i observacions de camp per identificar els mecanismes responsables de la resposta del terreny.
 Planificar programes d'experimentació en el laboratori.
 Formular i programar models numèrics Elements Finitos i Diferències Finites per analitzar els processos que regeixen la resposta del terreny, interpretar la informació de camp i predir la resposta del terreny.
 Analitzar, discriminar e integrar en estudis i projectes la informació geològica i geotècnica disponible.
 Realitzar el càlcul, l'avaluació, la planificació i la regulació dels recursos hídrics, tant de superfície com subterranis. (Competència específica de l'especialitat Hidrologia Subterrània).
 Avaluar i gestionar impactes ambientals deguts a emmagatzematge de residus, contaminació de sòls i contaminació d'aigües subterranies. (Competència específica de l'especialitat Hidrologia Subterrània).
 Modelar, avaluar i gestionar els recursos geològics, incloses les aigües subterranies, minerals i termals. (Competència específica de l'especialitat Hidrologia Subterrània).

- * Coneix l'existència dels isòtops i les tècniques isotòpiques bàsiques pels estudis hidrogeològics.
 - * Distingeix isòtops estables i radioactius i les diferents aplicacions que es deriven
 - * Coneix i utilitza les tècniques modernes de datació d'aigües basades en tècniques isotòpiques.
 - * Coneix i utilitza les tècniques isotòpiques per a l'avaluació de processos de contaminació i descontaminació de sòls i aqüífers.
 - * Modela els processos químics en equilibri i cinètics des d'un punt de vista multidisciplinari, incorporant-hi conceptes termo-hidro-geoquímics.
 - * Planteja i resol en casos complexos les equacions de transport reactiu.
 - * Modelitza dades de problemes de transport en laboratori o al camp.
 - * S'introdueix en els reptes bàsics de l'heterogeneïtat del subsòl i les implicacions sobre les prediccions de transport en medis heterogenis.
 - * Analitza les aproximacions estocàstiques pel que fa a la quantificació dels fenòmens de transport induïts per l'heterogeneïtat.
 - * Adquireix les eines bàsiques de modelació estocàstica.
 - * S'exposa a les aproximacions modernes a la modelació del transport en medis heterogenis.
- Transport de contaminants. Advecció, difusió, dispersió, reaccions d'ordre 0 i 1. Adsorció. Equació de transport. Solucions.
 - Reaccions químiques en equilibri. Activitat d'espècies aquoses.
 - Llei d'acció de masses. Mescles perfectes i imperfectes. Gasos.
 - Cinètica química. Equacions de la cinètica. Ordre de la reacció. Reaccions en batch.
 - Transport reactiu. Matriu estequiomètrica i de components. Equacions de transport. Solució.
 - Transport reactiu en columnes.
 - Mètodes numèrics i modelació. Formulació genèrica d'un mètode numèric. Integració temporal. Condicions de contorn. Tipus de mètodes. Procés de modelació.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores aprenentatge autònom	80,0	63.95
Hores grup gran	19,5	15.59
Hores activitats dirigides	6,0	4.80
Hores grup mitjà	9,8	7.83
Hores grup petit	9,8	7.83

Dedicació total: 125.1 h



CONTINGUTS

Teoria

Descripció:

Introduction of the transport processes (advection, dispersion and diffusion) and chemical reactions (dissolution-precipitation, adsorption, speciation)

Monocomponent reactive transport equation. Notation of matrices and vectors. Stoichiometric matrix. Primary and secondary species.

Formulation of the basic reactive transport equation. Components and component matrix. Special case of half-reactions and constant activity species.

(Semi)analytical solutions for a simple binary system with an application to a fractured medium. (Semi)analytical solutions for a complex system with an application to calcite dissolution in a coastal zone

Method of Picard and Newton-Raphson. Application of Newton-Raphson to speciation. Application of Picard and Newton-Raphson to reactive transport. Comparison between both methods

The solution of exercise 1 is given in class.

The solution of exercise 2 is given in class.

Dedicació: 36h

Grup gran/Teoria: 13h

Grup mitjà/Pràctiques: 2h

Aprentatge autònom: 21h

Model codes

Descripció:

Explication and demo of the code Retraso

Practical use of the code Retraso to simulate bauxite formation

Dedicació: 14h 23m

Grup mitjà/Pràctiques: 3h

Grup petit/Laboratori: 3h

Aprentatge autònom: 8h 23m

Cases and systems

Descripció:

Diffusion in clays of reactive solutes

Equilibrium CO₂ calcite in shallow aquifers. CO₂ injection and storage in deep saline aquifers

Relation between redox and decay of organic matter. Reactive transport model of constructed wetland

Modelling the interaction between concrete and clay during 15 years in the underground laboratory of Tournemire

Thermodynamics of high salinity systems. 0D (ideally mixed) reactive transport models of saline lakes. 1D reactive transport models of saline aquifers.

Dedicació: 43h 12m

Grup gran/Teoria: 15h

Grup petit/Laboratori: 3h

Aprentatge autònom: 25h 12m



SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

The course evaluated through two exercises to be made at home and an assignment that have to be presented in class. The final mark is:

$$N_{fin} = 0.2N_{ex1} + 0.2N_{ex2} + 0.6N_{ass}$$

where N_{ex1} is the mark of exercise 1, N_{ex2} is the mark of exercise 2 and where N_{ass} is the mark of the assignments

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Si no es realitza alguna de les activitats de laboratori o d'avaluació contínua en el període programat, es considerarà com a puntuació zero.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Bath, A.H.; Pearson, F.J.; Gautschi, A.; Waber, H.N. "Water-rock interactions in mudrocks and similar low permeability material". Cidu, R. (ed.). *Water-Rock Interaction: proceedings of the tenth International Symposium on Water-Rock Interaction, WRI-10, Villasimius Italy 10-15 July 2001* [en línia]. Lisse ; Exton (PA): A.A. Balkema, 2001. pp. 3-12 [Consulta: 25/03/2021]. Disponible a: https://www.researchgate.net/publication/275650443_Water-Rock_Interactions_in_Mudrocks_and_Similar_Low_Permeability_Materia
- [- Bea, S.A.; Carrera, J.; Ayora, C.; Batlle, F. "Modeling of concentrated aqueous solutions : efficient implementation of Pitzer equations in geochemical and reactive transport models". *Computers & Geosciences* [en línia]. vol. 36, issue 4, pp. 526-538 [Consulta: 26/07/2021]. Disponible a: <https://www.sciencedirect.com/recursos.biblioteca.upc.edu/science/article/pii/S0098300409003264>
- Christensen, T.H.; Bjerg, P.L.; Banwart, S.A.; Jakobsen, R.; Heron, G.; Albrechtsen, H.-J. "Characterization of redox conditions in groundwater contaminant plumes". *Journal of contaminant hydrology* [en línia]. vol. 45, issues 3-4, oct. 2000, pp. 165-241 [Consulta: 02/02/2021]. Disponible a: <https://www.sciencedirect.com/recursos.biblioteca.upc.edu/science/article/pii/S0169772200001091>
- De Simoni, M., J. Carrera, X. Sánchez-Vila, A. Guadagnini. A procedure for the solution of multicomponent reactive transport problems, *Water Resour. Res.*, 41, W11410. 2005.
- De Simoni, M., X. Sanchez-Vila, J. Carrera, M. W. Saaltink. A mixing ratios-based formulation for multicomponent reactive transport, *Water Resour. Res.*, 43, W07419. 2007.
- Gamazo, P ; Bea, S.A ; Saaltink, M.W ; Carrera, J ; Ayora, C. "Modeling the interaction between evaporation and chemical composition in a natural saline system". *Journal of Hydrology* [en línia]. 2011, vol. 401 (3), pp. 154-164 [Consulta: 26/07/2021]. Disponible a: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.02.018>
- Horsman S. T., Higgo J. J. W., Alexander J., Harrington J. F.. *Water, Gas and Solute Movement Through Argillaceous Media*. Report CC-96/1. Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Co-Operation and Development. 290 pp.. 1996.
- Lichtner, P.C., Steefel, C.I., Oelkers, C.I.. *Reactive Transport in Porous Media*. Washington DC: Mineral Society of America, 1996.
- Martínez-Landa, L.; Carrera, J.; Dentz, M.; Fernández-García, D.; Nardí, A.; Saaltink, M.W. "Mixing induced reactive transport in fractured crystalline rocks". *Applied Geochemistry* [en línia]. 2012, vol. 27, issue 2, pp. 479-489 [Consulta: 11/05/2021]. Disponible a: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0883292711004069>
- Nasri, N.; Bouhlila, R.; Saaltink, M. W.; Gamazo, P. "Modeling the hydrogeochemical evolution of brine in saline systems : case study of the Sabkha of Oum El Khialate in South East Tunisia". *Applied Geochemistry* [en línia]. Abril 2015, vol. 55, pp. 160-169 [Consulta: 26/07/2021]. Disponible a: <http://hdl.handle.net/2117/27880>
- Ojeda, E.; Caldentey, J.; Saaltink, M.W.; García, J. "Evaluation of relative importance of different microbial reactions on organic matter removal in horizontal subsurface-flow constructed wetlands using a 2D simulation model". *Ecological engineering : the journal of ecotechnology* [en línia]. 2008, vol. 34, issue 4, pp. 65-75 [Consulta: 19/02/2021]. Disponible a: <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2008.05.007>
- Pearson F. J.. What is the Porosity of a Mudrock? In: A. C. Aplin, A. J. Fleet and J. H. S. MacQuaker (eds.) *Muds and Mudstones: Physical and Fluid Flow Properties*. Special Publications 158, 9-21. London: Geological Society, 1999.
- Saaltink, M.W., C. Ayora, J. Carrera. A mathematical formulation of reactive transport that eliminates mineral concentrations, *Water Resour. Res.*, 34(7), 1649-1656. 1998.
- Saaltink, M.W., J. Carrera, C. Ayora. On the behavior of approaches to simulate reactive transport, *J. Contam. Hydrol.*, 48(3-4), 213-235. 2001.
- Saaltink M. W., F. Batlle, C. Ayora, J. Carrera, S. Olivella. RETRASO, a code for modeling reactive transport in saturated and unsaturated porous media. *Geologica Acta*, 2, 235-251. 2004.
- Saaltink, M. W., V. Vilarrasa, F. D. Gaspari, O. Silva, J. Carrera, T.S. Rötting. A method for incorporating equilibrium chemical reactions into multiphase flow models for CO2 storage. *Advances in Water Resources* 62, 431-441. 2013.
- Soler J. M.. Reactive transport modeling of concrete-clay interaction during 15 years at the Tournemire Underground Rock Laboratory. *European Journal of Mineralogy* 25(4), 639-654.. 2013.
- Van der Lee J., L. De Windt. Present state and future directions of modeling of geochemistry in hydrogeological systems. *Journal of Contaminant Hydrology* 47, 265-282.. 2001.
- Van Loon L. R., Soler J. M.. Diffusion of HTO, 36Cl-, 125I- and 22Na+ in Opalinus Clay: Effect of Confining Pressure, Sample Orientation, Sample Depth and Temperature [en línia]. Paul Scherrer Institut, 2004 [Consulta: 26/03/2021]. Disponible a: <https://cutt.ly/GxFA3Iy>
- Van Loon L. R., P. Wersin, J. M. Soler., J. Eikenberg, Th. Gimmi, P. Hernán, S. Dewonck, S. Savoye. In-Situ Diffusion of HTO, 22Na+, Cs+ and I- in Opalinus Clay at the Mont Terri Underground Rock Laboratory. *Radiochimica Acta* 92, 757-763. 2004.
- Yechielia, Y.; Wood, W.W. "Hydrogeologic processes in saline systems : playas, sabkhas, and saline lakes". *Earth-science reviews* [en línia]. 2002, vol. 58, issues 3-4, pp. 343-365 [Consulta: 08/03/2021]. Disponible a: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0012825202000673>