



## Guía docente

### 250824 - 250824 - Modelación Hidrogeoquímica

Última modificación: 12/12/2019

**Unidad responsable:** Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos de Barcelona

**Unidad que imparte:** 751 - DECA - Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental.

**Titulación:** **Curso:** 2019

**Créditos ECTS:** 5.0

**Idiomas:** Catalán, Castellano, Inglés

#### PROFESORADO

---

**Profesorado responsable:** MAARTEN WILLEM SAALTINK

**Otros:** CRISTINA DOMENECH ORTI, MAARTEN WILLEM SAALTINK

#### COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

---

##### Específicas:

13311. Formular y programar modelos numéricos Elementos Finitos y Diferencias Finitas para analizar los procesos que rigen la respuesta del terreno, interpretar la información de campo y predecir la respuesta del terreno.

13323. Modelar, evaluar y gestionar los recursos geológicos, incluidas las aguas subterráneas, minerales y termales. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).

##### Genéricas:

13300. Aplicar conocimientos de ciencias y tecnología avanzadas a la práctica profesional o investigadora de la Ingeniería del Terreno

13301. Dirigir, coordinar y desarrollar proyectos completos en el campo de la Ingeniería del Terreno.

13302. Identificar y dissenyar soluciones para los problemas de Ingeniería del Terreno en un marco ético, social, económico y legislativo

13303. Evaluar el impacto de la Ingeniería del Terreno en el medio ambiente, el desarrollo sostenible de la sociedad y la importancia de trabajar en un entorno profesional responsable.

13304. Incorporar nuevas tecnologías y herramientas avanzadas de la Ingeniería del Terreno en sus actividades profesionales o investigadoras

13305. Conceptualizar la Ingeniería del Terreno como un campo multidisciplinar que requiere incluir aspectos relevantes de geología, sismología, hidrogeología, ingeniería geotécnica y sísmica, geomecánica, física de medios porosos, geofísica, geomática, riesgos naturales, energía e interacción con el clima.

13306. Innovar en el planteamiento de metodologías, análisis y soluciones en problemas de Ingeniería del Terreno.

13307. Abordar y resolver problemas matemáticos avanzados de ingeniería desde el planteamiento del problema hasta el desarrollo de la formulación y su implementación en un programa de ordenador. En particular, formular, programar y aplicar modelos analíticos y numéricos avanzados de cálculo al proyecto, planificar y gestionar, así como interpretar los resultados obtenidos en el contexto de la Ingeniería del Terreno y la Ingeniería de Minas.

#### METODOLOGÍAS DOCENTES

---

El curso se divide en sesiones teóricas y problemas, donde se prevee el uso de programas convencionales de cálculo geoquímico.

## OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Conceptualizar los suelos y las rocas como medios porosos regidos por conceptos de Mecánica de Sólidos y de Fluidos.  
 Formular y programar modelos numéricos Elementos Finitos y Diferencias Finitas para analizar los procesos que rigen la respuesta del terreno, interpretar la información de campo y predecir la respuesta del terreno.  
 Analizar, discriminar e integrar en estudios y proyectos la información geológica y geotécnica disponible.  
 Realizar el cálculo, la evaluación, la planificación y la regulación de los recursos hídricos, tanto de superficie como subterráneos. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).  
 Evaluar y gestionar impactos ambientales debidos a almacenamiento de residuos, contaminación de suelos y contaminación de aguas subterráneas. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).  
 Proyectar y ejecutar instalaciones hidráulicas, incluyendo instalaciones de transporte, distribución y almacenamiento de sólidos, líquidos y gases, plantas de tratamiento de aguas y de gestión de residuos (urbanos, industriales o peligrosos). (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).  
 Evaluar y gestionar ambientalmente proyectos, plantas o instalaciones hidráulicas. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).  
 Modelar, evaluar y gestionar los recursos geológicos, incluidas las aguas subterráneas, minerales y termales. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).

- \* Conoce los principios básicos del flujo y el transporte multifásico de contaminantes en la zona saturada y no saturada del subsuelo.
  - \* Entiende el comportamiento y los mecanismos de transporte de contaminantes orgánicos en fase líquida no acuosa que son poco solubles en agua
  - \* Conoce los esquemas de remediación de suelos y acuíferos y es capaz de realizar una modelación matemática de los mismos.
  - \* Es capaz de realizar un estudio sobre el impacto potencial de un problema de contaminación de suelos o aguas sobre la población o los ecosistemas.
  - \* Entiende los procesos termodinámicos y su implicación en la firma química de un agua
  - \* Conoce y modela los procesos fundamentales de transferencia de masa en equilibrio
  - \* Reconoce la importancia de la cinética química y la existencia de modelos geoquímicos avanzados
  - \* Resuelve problemas geoquímicos sencillos
- Termodinámica: Energía interna, entropía, entalpía, energía libre de Gibbs.
  - Propiedades termodinámicas de sustancias no puras. Constante de equilibrio de una reacción química.
  - Estructura de una solución acuosa. Fuerza iónica. Actividad del agua. Modelos de cálculo del coeficiente de actividad de un soluto.
  - Ácido-base: Acidez y alcalinidad químicas. Control del pH en las aguas continentales. Capacidad de neutralización.
  - Cálculo del equilibrio solución-mineral-gas
  - Reacciones de superficie: Modelo de complejación superficial. Intercambio iónico.
  - Redox: Relación entre potencial medido y propiedades termodinámicas. La variable pE. Diagramas pE-pH. Potencial redox en aguas naturales. Ciclo biogeoquímico.
  - Cinética: Reacciones elementales y totales. Velocidad de reacción. Efecto de la temperatura.

## HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo mediano	9,8	7.83
Horas actividades dirigidas	6,0	4.80
Horas grupo grande	19,5	15.59
Horas aprendizaje autónomo	80,0	63.95
Horas grupo pequeño	9,8	7.83

**Dedicación total:** 125.1 h



## CONTENIDOS

### Introducción

**Descripción:**

Modelos geoquímicos: utilidad y limitaciones. Programa del curso

**Dedicación:** 4h 48m

Grupo grande/Teoría: 2h

Aprendizaje autónomo: 2h 48m

### Termodinámica

**Descripción:**

Energía interna. Función de estado. Entropía. Propiedades intensivas. Potenciales termodinámicos. Entalpía. Energía libre de Gibbs. Estado estandar. Propiedades termodinámicas de sustancias puras a cualquier presión y temperatura

**Dedicación:** 7h 11m

Grupo grande/Teoría: 3h

Aprendizaje autónomo: 4h 11m

### Termodinámica de soluciones

**Descripción:**

Propiedades termodinámicas de sustancias no puras. Estado estandar de una solución. Constante de equilibrio de una reacción química. Variación con la presión y la temperatura.

Problema: Cálculo del producto de solubilidad de la calcita entre 0 y 300°C y presión de vapor de agua

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m

### Soluciones acuosas

**Descripción:**

Estructura de una solución acuosa. Fuerza iónica. Actividad del agua. Actividad media de un soluto. Modelos de cálculo del coeficiente de actividad de un soluto. Actividad de una especie neutra.

Problema: Agua de mar

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m



### Complejos acuosos

**Descripción:**

Hidrólisis y potencial iónico. Complejos de esfera interna y externa. Importancia de la complejación en el cálculo de la fuerza iónica. Idem en la solubilidad de un sólido o un gas.

Problema: Solubilidad del yeso

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m

### Acido-base

**Descripción:**

Acidez y alcalinidad químicas. Sistema carbónico. Control del pH en las aguas continentales. Valoración de la alcalinidad. Capacidad de neutralización. Programa MEDUSA.

Problema: Distribución de especies de Al con el pH. Contaminación de un río por agua ácida.

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m

### Cálculo del equilibrio solución-mineral-gas

**Descripción:**

Conceptos básicos. Formulación matemática: sistemas de ecuaciones. Método iterativo de Newton-Raphson. Ejemplos de especiación y equilibrio entre fases. El programa PHREEQC.

**Dedicación:** 7h 11m

Grupo grande/Teoría: 3h

Aprendizaje autónomo: 4h 11m

### Cálculo de procesos

**Descripción:**

Disolución de un mineral o gas hasta equilibrio. Perturbación conocida de un componente: valoración de acidez o alcalinidad, disolución conocida de mineral o gas. Perturbación de todos los componentes: mezcla de soluciones, evaporación.

**Dedicación:** 4h 48m

Grupo grande/Teoría: 2h

Aprendizaje autónomo: 2h 48m



### Reacciones de superficie

**Descripción:**

Modelo de complejación superficial. Modelos electrostáticos y no electrostáticos. Modelos empíricos. Intercambio iónico. Ejemplos: retención de Zn y As por óxidos de hierro.

Problema: Adsorción de Ni en bentonita.

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m

### Redox

**Descripción:**

Electrodo estándar de hidrógeno. Relación entre potencial medido y propiedades termodinámicas. La variable pE. Diagramas pE-pH. Potencial redox en aguas naturales. Ciclo biogeoquímico.

Problema: Oxidación de materia orgánica

**Dedicación:** 9h 36m

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 5h 36m

### Cinética

**Descripción:**

Reacciones elementales y totales. Velocidad de reacción. Efecto de la temperatura. Ejemplos de reacciones: oxidación-reducción, disolución-precipitación. Cinética versus equilibrio: hipótesis de equilibrio local.

**Dedicación:** 7h 11m

Grupo grande/Teoría: 3h

Aprendizaje autónomo: 4h 11m

### Cálculos geoquímicos en el Transporte Fundamentos

**Descripción:**

Procesos de transporte: difusión, advección, dispersión. Ecuación de continuidad. Acoplamiento de transporte y reacciones químicas. Resolución. Transporte reactivo con PHREEQC. Ejemplo: Desplazamiento de agua marina por agua continental.

**Dedicación:** 4h 48m

Grupo grande/Teoría: 2h

Aprendizaje autónomo: 2h 48m

## SISTEMA DE CALIFICACIÓN

La evaluación se basará en la resolución de problemas.

## NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Si no se realiza alguna de las actividades de laboratorio o de evaluación continua en el periodo programado, se considerará como puntuación cero.



## BIBLIOGRAFÍA

---

### Básica:

- Anderson G.M. i Crerar D.A. Thermodynamics in Geochemistry. Oxford: Oxford University Press, 1993. ISBN 019506464X.
- Nordstrom D.K. i Munoz J.L. Geochemical Thermodynamics. 2nd ed. Boston: Blackwell Scientific, 1994. ISBN 0865422745.
- Galí, S. Termodinámica aplicada a la geología. Barcelona: Edicions Universitat de Barcelona, 1999. ISBN 8483381001.
- Appelo C.A.J.; Postma, D. Geochemistry, groundwater and pollution. 2nd ed. Rotterdam: Balkema, 2005. ISBN 0415364213.
- Morel, F.M.M.; Hering, J.G. Principles and applications of aquatic chemistry. New York [etc.]: Wiley, 1993. ISBN 0471548960.
- Langmuir, D. Aqueous environmental geochemistry. Upper Saddle River (N.J.): Prentice Hall, 1997. ISBN 0023674121.
- Stumm W. i Morgan J.J. Aquatic chemistry. 3a ed. New York: John Wiley and Sons, 1996. ISBN 0471511854.