

## Guía docente

### 250826 - 250826 - Transporte Reactivo

Última modificación: 07/10/2020

**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:** MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA DEL TERRENO (Plan 2015). (Asignatura optativa).

**Curso:** 2020      **Créditos ECTS:** 5.0      **Idiomas:** Castellano, Inglés

#### PROFESORADO

---

**Profesorado responsable:** MAARTEN WILLEM SAALTINK

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

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

---

##### Específicas:

13310. Interpretar ensayos de laboratorio y observaciones de campo para identificar los mecanismos responsables de la respuesta del terreno. Planificar programas de experimentación en el laboratorio.

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.

##### 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

---

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.

## 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.  
 Interpretar ensayos de laboratorio y observaciones de campo para identificar los mecanismos responsables de la respuesta del terreno. Planificar programas de experimentación en el laboratorio.  
 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).  
 Modelar, evaluar y gestionar los recursos geológicos, incluidas las aguas subterráneas, minerales y termales. (Competencia específica de la especialidad Hidrología Subterránea).

- \* Conoce la existencia de los isótopos y las técnicas isotópicas básicas para los estudios hidrogeológicos
  - \* Distingue isótopos estables y radioactivos y las distintas aplicaciones que se derivan
  - \* Conoce y usa las técnicas modernas de datación de aguas basadas en técnicas isotópicas
  - \* Conoce y usa las técnicas isotópicas para la evaluación de procesos de contaminación y descontaminación de suelos y acuíferos
  - \* Modela los procesos químicos en equilibrio y cinéticos desde un punto de vista multidisciplinar, incorporando conceptos termo-hidro-geoquímicos
  - \* Plantea y resuelve en casos complejos las ecuaciones de transporte reactivo.
  - \* Modeliza datos de problemas de transporte en laboratorio o en campo
  - \* Se introduce en los retos básicos de la heterogeneidad del subsuelo y las implicaciones sobre las predicciones de transporte en medios heterogéneos
  - \* Analiza las aproximaciones estocásticas en cuanto a la cuantificación de los fenómenos de transporte inducidos por la heterogeneidad.
  - \* Adquiere las herramientas básicas de modelación estocástica
  - \* Se expone a las aproximaciones modernas a la modelación del transporte en medios heterogéneos.
- Transporte de contaminantes. Advección, difusión, dispersión, reacciones de orden 0 y 1. Adsorción. Ecuación de transporte. Soluciones.
  - Reacciones químicas en equilibrio. Actividad de especies acuosas
  - Ley de acción de masas. Mezclas perfectas e imperfectas. Gases
  - Cinética Química. Ecuaciones de la cinética. Orden de la reacción. Reacciones en batch
  - Transporte reactivo. Matriz estequiométrica y de componentes. Ecuaciones de transporte. Solución.
  - Transporte reactivo en columnas
  - Métodos numéricos y modelación. Formulación genérica de un método numérico. Integración temporal. Condiciones de Contorno. Tipos de métodos. Proceso de modelación.

## HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

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

**Dedicación total:** 125.1 h



## CONTENIDOS

### Teoría

**Descripción:**

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.

**Dedicación:** 36h

Grupo grande/Teoría: 13h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

Aprendizaje autónomo: 21h

### Model codes

**Descripción:**

Explication and demo of the code Retraso

Practical use of the code Retraso to simulate bauxite formation

**Dedicación:** 14h 23m

Grupo mediano/Prácticas: 3h

Grupo pequeño/Laboratorio: 3h

Aprendizaje autónomo: 8h 23m

### Cases and systems

**Descripción:**

Diffusion in clays of reactive solutes

Equilibrium CO<sub>2</sub> calcite in shallow aquifers. CO<sub>2</sub> 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.

**Dedicación:** 43h 12m

Grupo grande/Teoría: 15h

Grupo pequeño/Laboratorio: 3h

Aprendizaje autónomo: 25h 12m



## SISTEMA DE CALIFICACIÓN

---

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

## 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:

- 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 línea]. 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\\_Material](https://www.researchgate.net/publication/275650443_Water-Rock_Interactions_in_Mudrocks_and_Similar_Low_Permeability_Material).
- 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 línea]. 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 línea]. 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 línea]. 2011, vol. 401 (3), pp. 154-164 [Consulta: 26/07/2021]. Disponible a: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.02.018>.
- Horseman 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 línea]. 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 línea]. 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 línea]. 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 CO<sub>2</sub> 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<sup>-</sup>, 125I<sup>-</sup> and 22Na<sup>+</sup> in Opalinus Clay: Effect of Confining Pressure, Sample Orientation, Sample Depth and Temperature [en línea]. 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<sup>+</sup>, Cs<sup>+</sup> and I<sup>-</sup> in Opalinus Clay at the Mont Terri Underground Rock Laboratory. *Radiochimica Acta* 92, 757-763. 2004.
- Yecheilia, Y.; Wood, W.W. "Hydrogeologic processes in saline systems : playas, sabkhas, and saline lakes". *Earth-science reviews* [en línea]. 2002, vol. 58, issues 3-4, pp. 343-365 [Consulta: 08/03/2021]. Disponible a: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0012825202000673>.