

Guia docent

Modelización del Transporte Reactivo

Última modificació:

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 HIDROLOGIA SUBTERRÀNIA

Curs: 2026 **Crèdits ECTS:** 5.0 **Idiomes:** Castellano

PROFESSORAT

Professorat responsable: Maarten W. Saaltink

Altres:

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

- Identificar procesos hidrodinámicos, geoquímicos, biológicos e isotópicos relacionados con el flujo de aguas subterráneas y el transporte reactivo de solutos en el subsuelo.
- Identificar soluciones tecnológicas a problemas ambientales relacionados con las aguas subterráneas, así como con aquellas masas de agua superficial que dependen de la descarga de aguas subterráneas, incluyendo los problemas asociados a la construcción de obras civiles, la minería y la gestión de residuos sólidos, entre otros.
- Reconocer todas las tecnologías avanzadas empleadas en proyectos de mantenimiento, conservación y restauración de las aguas subterráneas y los recursos hídricos y energéticos en su ámbito.
- Identificar procesos hidrodinámicos, geoquímicos, biológicos e isotópicos relacionados con el flujo de aguas subterráneas y el transporte reactivo de solutos en el subsuelo.
- Diseñar soluciones convencionales y no convencionales a problemas hidrogeológicos y de recursos hídricos y plantear su balance de masa y energía.
- Evaluar esquemas de mitigación y/o descontaminación de acuíferos y suelos para emplazamientos contaminados.

METODOLOGIES DOCENTS

La asignatura se organiza en clases teóricas y prácticas. En las clases teóricas, se explican conceptos y fundamentos acompañados de ejemplos para facilitar su comprensión. En las clases prácticas se usan códigos informáticos para calcular casos concretos. Además, habrá ejercicios que los estudiantes deberán completar fuera de clase y cuya resolución se abordará en las sesiones presenciales. Cada estudiante o grupo de estudiantes, en función del número de estudiantes, debe realizar un trabajo individual.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

El objetivo de la asignatura es proporcionar a los estudiantes una comprensión profunda de la interacción entre los procesos de transporte y las reacciones químicas que tienen lugar en el agua subterránea. Incluye el uso de modelos analíticos y numéricos para su cálculo. Para ello, es necesario familiarizarse con ciertos conceptos fundamentales empleados en el ámbito del transporte reactivo. A final de la asignatura el estudiante debe ser capaz de realizar un estudio de modelización de transporte reactivo.

HORES TOTS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	45.1	
Hores grup petit		
Hores grup mitjà		
Hores aprenentatge autònom	80	

Dedicació total: 125.1 h

CONTINGUTS

Teoría y Conceptos

Descripció:

Este tema comienza con un repaso de los procesos de transporte, como la advección, la dispersión y la difusión, así como las reacciones químicas, como la disolución-precipitación, la adsorción y la especiación.

A continuación, se procede a la formulación matemática del transporte reactivo. Para ello, se emplea una notación matricial y vectorial que se abordará en primer lugar. Con esta notación se explican conceptos importantes del transporte reactivo, como la matriz estequiométrica, las especies primarias y secundarias y la matriz de componentes. Dichos conceptos se utilizan para formular la ecuación básica del transporte reactivo. También se explica el caso especial de las semirreacciones y de las especies de actividad constante.

A continuación, se explican los métodos para resolver las ecuaciones de transporte reactivo. Estos métodos incluyen tanto los analíticos como los numéricos. Las soluciones analíticas se ilustran con un ejemplo sencillo de un sistema binario y otro más complejo sobre la disolución de la calcita. Los métodos numéricos incluyen el método de Picard y el método de Newton-Raphson, la aplicación del método de Newton-Raphson al problema de la especiación, la aplicación de los métodos de Picard y Newton-Raphson al problema del transporte reactivo y el método de mezcla de agua.

Grup gran/Teoria:

Grup mitjà/Pràctiques:

Aprenentatge autònom:

Herramientas de Modelización

Descripció:

En este tema se trabajará con códigos informáticos de modelización numérica, que pueden ser Phreeqc y/u otros. En primer lugar, se explicarán los pasos para construir el modelo conceptual. Después, habrá clases prácticas en las que los estudiantes deberán utilizar los códigos para resolver problemas específicos de transporte reactivo.

Dedicació:

Grup gran/Teoria:

Grup mitjà/Pràctiques:

Aprenentatge autònom:

Casos y sistemas

Descripció:

Este tema muestra algunos casos típicos de transporte reactivo en sistemas naturales y artificiales. Estos pueden incluir:

- La interacción del CO₂ en acuíferos calcáreos. También incluye la inyección y almacenamiento de CO₂ en acuíferos salinos profundos.
- La degradación del carbono orgánico en una secuencia redox. Se explica el caso particular de los humedales artificiales y la recarga artificial.
- Sistemas evaporativos de alta salinidad.

Dedicació:

Grup gran/Teoria:

Grup mitjà/Pràctiques:

Aprenentatge autònom:

Avaluació

Descripció:

La asignatura termina con una clase invertida, en la que los estudiantes o grupos de estudiantes presentan su trabajo individual.

Dedicació:

Grup petit/Laboratori:

Aprenentatge autònom:

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

La evaluación de la asignatura se basa en la media de las notas obtenidas en los ejercicios y trabajos realizados por los estudiantes.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Si no se realiza algún ejercicio o trabajo, se asigna una nota de cero.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Bundschuh J.; Zilberbrand, M. (2012). Geochemical Modeling of Groundwater, Vadose and Geothermal Systems, 305 pages. CRC Press/Balkema, Leiden, ISBN 978-0-415-66810-1.
- Carrera, J.; Saaltink, M.W.; Soler-Sagarra, J.; Wang, J.; Valhondo, C. (2022). Reactive Transport: A Review of Basic Concepts with Emphasis on Biochemical Processes. Energies, 15, 925. <https://doi.org/10.3390/en15030925>.
- Lichtner, P.C., Steefel, C.I., Oelkers, C.I. (1996). Reactive Transport in Porous Media. Washington DC: Mineral Society of America.
- Van der Lee, J.; De Windt, L. (2001). Present state and future directions of modeling of geochemistry in hydrogeological systems. Journal of Contaminant Hydrology 47, 265-282. [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(00\)00155-8](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(00)00155-8).

Complementària:

- Bea, S. A.; Carrera, J.; Ayora, C.; Batlle, F. (2010). Modeling of concentrated aqueous solutions: Efficient implementation of Pitzer equations in geochemical and reactive transport models, Computers & Geosciences, 36(4), 526-538, <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2009.09.004>.
- Christensen, T. H.; Bjerg, P. L.; Banwart, S. A.; Jakobsen, R.; Heron, G.; Albrechtsen, H.-J. (2000). Characterization of redox conditions in groundwater contaminant plumes, Journal of Contaminant Hydrology, 45(3-4), 165-241. [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(00\)00109-1](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(00)00109-1).
- De Simoni, M., Carrera, J., Sanchez-Vila, X., Guadagnini, A., 2005. A procedure for the solution of multicomponent reactive transport problems. Water Resources Research, 41, W11410. <https://doi.org/10.1029/2005WR004056>.
- De Simoni, M., Sanchez-Vila, X., Carrera, J., Saaltink, M.W., 2007. A mixing ratios-based formulation for multicomponent reactive transport. Water Resources Research, 43, W07419. <https://doi.org/10.1029/2006WR005256>.
- Gamazo, P., Bea, S. A.; Saaltink, M. W.; Carrera, J.; Ayora, C. (2011), Modeling the interaction between evaporation and chemical composition in a natural saline system, Journal of Hydrology, 401, 154-164. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.02.018>.
- Martínez-Landa, L.; Carrera, J.; Dentz, M.; Fernández-García, D.; Nardi, A.; Saaltink M. W. (2012). Mixing Induced Reactive Transport in Fractured Crystalline Rocks, Applied Geochemistry, 27, 479-489. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2011.09.016>.
- Nasri, N.; Bouhlila, R.; Saaltink, M. W.; Gamazo, P. (2015). Modeling the hydrogeochemical evolution of brine in saline systems: Case study of the Sabkha of Oum El Khialate in South East Tunisia, Applied Geochemistry, 55, 160-169.

<https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2014.11.003>.

- Ojeda, E.; Caldentey, J. ; Saaltink, M.W.; García, J. (2008). 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*, 34, <https://doi.org/65-75>. 10.1016/j.ecoleng.2008.05.007.
- Saaltink, M.W.; Ayora, C.; Carrera, J. (1998). A mathematical formulation of reactive transport that eliminates mineral concentrations. *Water Resources Research*, 34(7), 1649-1656. <https://doi.org/10.1029/98WR00552>.
- Saaltink, M.W.; Carrera, J.; Ayora, C. (2001). On the behavior of approaches to simulate reactive transport, *Journal of Contaminant Hydrology*, 48(3-4), 213-235. [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(00\)00172-8](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(00)00172-8).
- Saaltink M. W.; Batlle, F.; Ayora, C.; Carrera, J.; Olivella, S. (2004). RETRASO, a code for modeling reactive transport in saturated and unsaturated porous media. *Geologica Acta*, 2, 235-251. 2004. <https://doi.org/10.1344/105.000001430>.
- Saaltink, M. W.; Vilarrasa, V.; Gaspari, F. D.; Silva, O.; Carrera, J.; Rötting, T. S. (2013). A method for incorporating equilibrium chemical reactions into multiphase flow models for CO₂ storage. *Advances in Water Resources*, 62, 431-441, <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.09.013>.
- Saaltink, M. W.; Rodríguez-Escales, P. (2022). Modeling the Organic Carbon Oxidation and Redox Sequence under the Partial-Equilibrium Approach: a Discussion by means of a Semi-Analytical Solution. *Water Resources Research*, 58, e2021WR031194. <https://doi.org/10.1029/2021WR031194>.
- Soler J. M. (2013). Reactive transport modeling of concrete-clay interaction during 15 years at the Tournemire Underground Rock Laboratory. *European Journal of Mineralogy* 25(4), 639-654. <https://doi.org/10.1127/0935-1221/2013/0025-2324>.
- Yechieli, Y.; Wood, W. W. (2002). Hydrogeologic processes in saline systems: playas, sabkhas, and saline lakes, *Earth-Science Reviews* 58, 343-365. [https://doi.org/10.1016/S0012-8252\(02\)00067-3](https://doi.org/10.1016/S0012-8252(02)00067-3).