

# Hydrogeochemical Modelling (250824)

## General Information

<b>School</b>	ETSECCPB
<b>Departments</b>	Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental (DECA)
<b>Credits</b>	5.0 ECTS
<b>Programs</b>	MÀSTER UNIVERSITARI EN ENGINYERIA DEL TERRENY (pla 2015)
<b>Course</b>	2024/25

## Main teaching language at each group

- Group 10ES1 Spanish (Q1)

## Faculty

Responsible Faculty: Maarten Willem Saaltink  
Faculty: Cristina Domenech Orti, Maarten Willem Saaltink

## Objectives of Education

To conceive soils and rocks as porous media governed by Solid and Fluid Mechanics.

To formulate and implement Finite Element and Finite Differences numerical models with the objective to analyze the processes that govern ground response, to interpret field information and to predict soil response.

To analyze, discriminate and integrate geological and geotechnical information in studies and projects.

To calculate, evaluate, plan and regulate surface and groundwater resources. (Specific competence of the specialization in Groundwater Hydrology).

To assess and manage environmental impacts from waste disposal, soil contamination and groundwater pollution. (Specific competence of the specialization in Groundwater Hydrology).

To design and execute hydraulic systems, including transportation facilities, distribution and storage of solids, liquids and gases, water treatment plants and waste management (urban, industrial or hazardous). (Specific competence of the specialization in Groundwater Hydrology).

To assess and manage projects, plants and water facilities for the environmental point of view. (Specific competence of the specialization in Groundwater Hydrology).

To model, assess and manage geological resources, including mineral and thermal groundwater. (Specific competence of the specialization in Groundwater Hydrology).

\* To know the main basic principles of multiphase contaminants flow and transportation in saturated and unsaturated areas of the subsoil.

\* To understand the behaviour and transportation mechanisms of organic contaminants in non aqueous liquid phase and showing scarce solubility in water.

\* To know the remediation outline for soils and aquifers and to be able to mathematically model them.

\* To be able to carry on a study on the potential impact of a soil or water contamination problem on the population or the ecosystems.

\* To understand the thermodynamic processes and their effect on the chemical signature of water.

\* To know and model the main mass balance transfer processes.

\* To understand the importance of chemical kinetics and existence of advanced geochemical models.

\* To solve simple geochemical problems.

- Thermodynamics: internal energy, entropy, enthalpy, Gibbs free energy .

- Thermodynamic properties of pure substances. Equilibrium constant of a chemical reaction.

- Structure of an aqueous solution. Ionic strength. Water activity. Models of calculation of the activity coefficient of a solute.

- Acid-base: chemical acidity and alkalinity. PH control in continental waters. Neutralization capacity.

- Calculation of solution - gas - mineral equilibrium.
- Surface reactions: surface complexation model. Ion exchange.
- Redox: Relationship between potential and measured thermodynamic properties. The variable pE. pE - pH diagrams. Redox potential in natural waters. Biogeochemical cycles.
- Kinetics: elementary and total reactions. Reaction rate. Effect of temperature.

## Total hours of student work

		Hours	Percentage
Supervised Learning	Large group	25.5 h	56.67 %
	Medium group	9.75 h	21.67 %
	Laboratory classes	9.75 h	21.67 %
	Guided Activities	0.0 h	0.00 %
Self Study		80.0 h	

## Contents

### Introducción

Modelos geoquímicos: utilidad y limitaciones. Programa del curso

### Termodinámica

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

### Termodinámica de soluciones

Propiedades termodinámicas de sustancias no puras. Estado estándar 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

### Soluciones acuosas

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

### Complejos acuosos

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

### Acido-base

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.

### Cálculo del equilibrio solución-mineral-gas

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

### Cálculo de procesos

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.

## Reacciones de superficie

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.

## Redox

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

## Cinética

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.

## Cálculos geoquímicos en el Transporte Fundamentos

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.

## Activities

### Resolución de problemas

#### Dedication

6h

## Teaching Methodology

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

Although most of the sessions will be given in the language indicated, sessions supported by other occasional guest experts may be held in other languages.

## Grading Rules

*(\*) The evaluation calendar and grading rules will be approved before the start of the course.*

The course is evaluated through exercises and a final assignment.

## Test Rules

Failure to perform a laboratory or continuous assessment activity in the scheduled period will result in a mark of zero in that activity.

## Bibliography

### Basic

- 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.
- B.J. Merkel; Planer-Friedrich, B. [Groundwater geochemistry: a practical guide to modeling of natural and contaminated aquatic systems](#). 2nd ed. Berlin ; Heidelberg: Springer, 2008. ISBN 978-3-540-74667-6.