



Guia docent

250MEA011 - 250MEA011 - Modelització del Transport de Contaminants

Última modificació: 21/06/2024

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 AMBIENTAL (Pla 2024). (Assignatura optativa).

Curs: 2024

Crèdits ECTS: 5.0

Idiomes: Castellà

PROFESSORAT

Professorat responsable: DANIEL FERNANDEZ GARCIA

Altres: MAARTEN W. SAALTINK

METODOLOGIES DOCENTS

L'assignatura consta de 3 hores a la setmana de classes presencials en una aula.

Es dediquen a classes teòriques 2 hores, en les que el professorat exposa els conceptes i materials bàsics de la matèria, presenta exemples i realitza exercicis.

Es dedica 1 hora, a la resolució de problemes amb una major interacció amb els estudiants. Es realitzen exercicis i treball pràctics per tal de consolidar els objectius d'aprenentatge generals i específics.

S'utilitza material de suport en format de pla docent detallat mitjançant: continguts, programació d'activitats d'avaluació i d'aprenentatge dirigit i bibliografia.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Saber resoldre problemes medioambientals mitjançant mètodes numèrics amb aplicació de conceptes teòrics de flux i transport de contaminants en el medi natural.

Aprendre a formular i programar models numèrics d'Elements Finitos i Diferències Finites per analitzar els processos que regeixen la resposta del medi natural, interpretar la informació de camp i predir la resposta del medi.

- Procés general de modelació de fenòmens naturals.
- Formulació bàsica de problemes de flux i transport de contaminants.
- Formulació de l'equació de flux.
- Resolució de l'equació de flux mitjançant mètodes numèrics.
- Metodologia per modelar el flux en aqüífers.
- Formulació de l'equació de transport.
- Problema invers i calibració
- Resolució numèrica de l'equació de transport i les seves dificultats.
- Casos reals.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	25,5	20.38
Hores grup mitjà	9,8	7.83
Hores grup petit	9,8	7.83
Hores aprenentatge autònom	80,0	63.95

Dedicació total: 125.1 h

CONTINGUTS

Introducció

Descripció:

Què és un model? Tipus. Utilitat. Dificultats. El procés de modelació

Un mètode numèric genèric. Aplicació a la resolució de l'equació de flux. Estructura típica d'un programa. Revisió dels mètodes numèrics més utilitzats i comparació dels mateixos. El procés de modelació. Model conceptual. Condicions de contorn i inicials.

Calibració i validació del mateix

Exemple d'il·lustració.

Dedicació: 2h

Grup gran/Teoria: 2h

Solució de l'equació de flux per Diferències Finites

Descripció:

Formulació general ec. Flujo (Repaso)

Esquema en diferències finites. Derivació formal

Mètodes de integració temporal. Esquemes implícit, explícit i de Crank-Nicholson. Condicions de Contorno. Tipus e implementació.

Estabilitat. Consistència i error de truncamiento. Convergència i error de convergència

Solució del sistema lineal de ecuaciones

Dedicació: 6h

Grup gran/Teoria: 6h

Solució de l'equació de flux mitjançant elements finits

Descripció:

Generalitats. Residus ponderats. Formulacions alternatives

Elements finits. Discretització i funcions de forma. Derivació d'equacions pel mètode de Galerkin.

Altres tipus d'elements. Simples, complexos, múltiples, isoparamètrics. Aplicació al cas simple 2D.

Esquemes d'integració temporal.

Aplicació a un cas unidimensional.

Dedicació: 6h

Grup gran/Teoria: 6h

Solució de la equació de transport mitjançant mètodes eulerians

Descripció:

Mecanismes del transport de soluts. Formulacions bàsiques

Diferències finides. Diferències finides integrades. Ponderació a contracorrent

Elements finits

Discussió de problemes d'estabilitat. Condicions sobre els nombres de Peclet i Courant

Aplicació a un cas unidimensional.

Dedicació: 6h

Grup gran/Teoria: 6h



Solució de l'equació de transport mitjançant mètodes lagrangians

Descripció:

Mètodes purament lagrangians. Avaluació de la derivada material. Limitacions
Mètodes eulerià-lagrangians. Mètodes de partícules
Mètode dels camins aleatoris
Comparació entre els diferents mètodes.

Dedicació: 4h

Grup gran/Teoria: 4h

Solució del problema invers i calibració automàtica

Descripció:

Calibració automàtica versus calibració manual
Regressió lineal i no lineal, matriu de sensibilitat
Estadístics de calibració

Dedicació: 4h

Grup gran/Teoria: 4h

Solució de problemes de flux i transport no lineals

Descripció:

Generalitats. Mètode de Newton-Raphson, Picard,...
Solució de l'ec. del flux per a aqüífer lliure. Exemple
Medi no saturat. Exemple
Transport Reactiu. Exemple

Dedicació: 3h

Grup gran/Teoria: 3h

Tallers pràctics

Descripció:

Aprendre el software MODEL MUSE

Dedicació: 8h

Grup gran/Teoria: 8h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

La qualificació de l'assignatura s'obté a partir de les qualificacions d'avaluació continuada i de les corresponents treballs pràctics. L'avaluació contínua consisteix a fer diferents activitats, tant individuals com de grup, de caràcter additiu i formatiu, realitzades durant el curs (dins de l'aula i fora d'ella).

Les proves d'avaluació consten d'una part amb qüestions sobre conceptes bàsics i associats als objectius d'aprenentatge de l'assignatura pel que fa al coneixement o la comprensió, i d'un conjunt d'exercicis d'entesa i aplicació.

La qualificació es fa d'acord al següent criteri:

$$NF = r * NE + (1-r) * NAC, r = 0,7$$

$$NAC = q * NAEP + (1-q) * NACET, q = 0,7$$

NF: Nota final

NE: Nota de l'examen

NAC: Nota de l'avaluació continuada

NAEP: Nota avaluació ensenyaments pràctics (treballs, presentacions, etc)

NACET: Nota avaluació continuada dels ensenyaments teòrics (test, etc)

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

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

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Zheng, C. Applied contaminant transport modeling: theory and practice. New York: Van Nostrand Reinhold, 1995. ISBN 0442013485.

- Anderson, M.P.; Woessner, W.W.; Hunt, R.J. Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport [en línia]. 2nd ed. Amsterdam, [Netherlands]: Academic Press, 2015 [Consulta: 04/10/2024]. Disponible a: https://web-p-ebsohost-com.recursos.biblioteca.upc.edu/plink?key=100.65.189.54_8000_228321815&AN=1037869&site=ehost-live&db=nlebk&scope=site. ISBN 9780080916385.

- Harbaugh, A.W.; Banta, E.R.; Hill, M.C.; McDonald, M.G. MODFLOW-2000: the U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model: user guide to modularization concepts and the ground-water flow process [en línia]. U.S. Geological Survey, 2000 [Consulta: 17/09/2024]. Disponible a: <https://pubs.usgs.gov/publication/ofr200092>.

- Istok, J. Groundwater modeling by the finite element method. Washington: American Geophysical Union, 1989. ISBN 0875903177.

- Pinder, G.F.; Gray, W.G. Finite element simulation in surface and subsurface hydrology. San Diego: Academic Press, 1977. ISBN 0125569505.

RECURSOS

Material informàtic:

- MODEL MUSE. ModelMuse és una interfície gràfica d'usuari (GUI) desenvolupada pel Servei Geològic dels Estats Units per a construir i executar models d'aigües subterrànies utilitzant MODFLOW i altres programes relacionats. Permet als usuaris crear i visualitzar malles de models, introduir paràmetres i condicions de contorn de manera interactiva. ModelMuse suporta el disseny i la simulació de processos complexos de flux i transport d'aigües subterrànies, oferint un entorn fàcil d'usar per a investigadors i professionals en hidrogeologia.