

## 1. IDENTIFICACION

<b>Materia:</b>	<b>TRANSPORTE DE CONTAMINANTES</b>
<b>Códigos:</b>	<b>SIRE: 6110 EIQ: IQ-ET53</b>
<b>Prelación:</b>	<b>IQ-5026, IQ-5016</b>
<b>Ubicación:</b>	<b>Electiva</b>
<b>TPLU:</b>	<b>2-0-2-3</b>
<b>Condición:</b>	<b>Electiva</b>
<b>Departamento:</b>	<b>Química Industrial y Aplicada</b>

## 2. JUSTIFICACION

*El estudiante de Ingeniería Química recibe una amplia formación sobre los fenómenos de transporte de masa, energía y cantidad de movimiento a lo largo de su plan curricular. Sin embargo es instruido exclusivamente para aplicar las ecuaciones de transferencia al diseño y control de equipos de importancia industrial.*

*A través del curso “Transporte de Contaminantes” el estudiante conocerá las diversas aplicaciones de las ecuaciones de transferencia al transporte natural de químicos en el medio ambiente, con la finalidad no sólo de estimar su concentración en los cuatro principales ecosistemas: atmósfera, hidrosfera, biosfera y litosfera; sino también de estimar la respuesta en el tiempo del ambiente luego de la introducción de compuestos antropogénicos.*

*Las nuevas regulaciones en materia ambiental a nivel nacional y mundial, exigen el control de las emisiones industriales y la aplicación de procesos correctivos a ambientes afectados. Los profesionales del área ingenieril deben por tanto, responder a la necesidad de evaluar el impacto ambiental de las operaciones que controlan y/o monitorean en su campo de trabajo.*

*Por todo lo anterior, se hace necesario proveer a los futuros egresados de la Escuela de Ingeniería Química de las herramientas para usar su conocimiento en fenómenos de transporte a la resolución de problemas ambientales.*

## 3. REQUERIMIENTOS

*Conocimientos de Química, Termodinámica, Fisicoquímica y Fenómenos de Transporte de Masa y Energía. Conocimientos de métodos numéricos impartidos en la materia Matemáticas Especiales.*

#### **4. OBJETIVOS**

##### **GENERALES**

- *Proveer al estudiante de las herramientas que le permitan aplicar las ecuaciones de transferencia de masa, energía y cantidad de movimiento al análisis de la dispersión en el ambiente de compuestos antropogénicos en efluentes industriales.*
- *Instruir al estudiante en los procedimientos para estimar la respuesta y/o recuperación en el tiempo del ambiente luego de la introducción de compuestos de origen antropogénico*

##### **ESPECIFICOS**

- *Introducir al estudiante con los conceptos de equilibrio químico y térmico en las interfases ambientales: aire-agua, aire-suelo y suelo-agua.*
- *Familiarizar al estudiante con las fuerzas naturales, derivadas de la radiación solar, que guían los mecanismos de dispersión, degradación y acumulación de compuestos antropogénicos en el ambiente.*
- *Lograr que el estudiante aplique los conceptos de equilibrio y los modelos de transporte en estado estacionario para determinar las concentraciones de químicos en los compartimientos naturales: aire, agua, suelo.*
- *Lograr que el estudiante aplique los conceptos de equilibrio y los modelos de transporte en estado dinámico para determinar la variación de la concentración en el tiempo de químicos en los compartimientos naturales: aire, agua, suelo.*

#### **5. CONTENIDO PROGRAMATICO**

##### **CAPITULO 1. INTRODUCCION**

*Principales ecosistemas y sus características: atmósfera, biosfera, litosfera, hidrosfera. Concepto de contaminante. Principales contaminantes, fuentes y efectos. Mecanismos naturales de transporte y transformación de compuestos químicos en el ambiente. Importancia de la evaluación del impacto ambiental de las actividades industriales. Regulaciones Ambientales a nivel nacional y mundial.*

##### **CAPITULO 2. COMPONENTES DE UN MODELO AMBIENTAL**

*Repaso de las ecuaciones básicas de los fenómenos de transporte. Forma diferencial de las ecuaciones de continuidad, movimiento y energía. Variables espaciales y su representación matricial y/o vectorial. Tipos de emisiones según su relación espacio-tiempo. Mecanismos de transporte según la relación fuente-receptor. Cinética y equilibrio de las reacciones químicas de transformación. Difusión y leyes de Fick. Teorías de transferencia de masa; modelo de capa estancada, teoría de penetración, teoría de renovación superficial, teoría de capa límite. Tipos de enfoques de modelado. Herramientas para la resolución de modelos.*

### **CAPITULO 3. DETERMINACION DE LAS PROPIEDADES FISICOQUIMICAS DE COMPUESTOS QUIMICOS**

*Clasificación de los contaminantes de acuerdo a su estructura molecular. Impacto de la estructura molecular de los compuestos químicos sobre su estado físico, solubilidad en fase acuosa, reactividad y toxicidad. Determinación del estado físico de existencia, solubilidad en fase acuosa y presión de vapor de compuestos químicos en condiciones ambientales. Estimación de la difusividad molecular para gases, líquidos y sólidos en función de la temperatura.*

### **CAPITULO 4. MODELO DE COMPARTIMIENTOS EN EQUILIBRIO**

*Modelo de compartimientos naturales en equilibrio: nivel I, nivel II y nivel III. Paquetes computarizados disponibles para la resolución de modelos.*

*Determinación de las constantes de equilibrio para la distribución de compuestos químicos en las interfases aire-agua, aire- solvente(s) orgánico(s), agua-solvente(s) orgánico(s), agua-sedimento, agua-materia orgánica en suelo.*

*La constante de Henry y su dependencia respecto a la temperatura, presión y composición de la solución. Distribución de un compuesto en dos fases líquidas inmiscibles o parcialmente miscibles.*

*El coeficiente octanol-agua y su dependencia con la temperatura y salinidad. Adsorción de gases y líquidos sobre sólidos. Isotermas de adsorción. El coeficiente agua-materia orgánica en suelo y el coeficiente agua-suelo.*

*Distribución de contaminantes en seres vivos. Factor de Bio-concentración. Coeficientes de partición para las interacciones plantas/contaminantes.*

### **CAPITULO 5. METODOS NUMERICOS USADOS EN MODELADO AMBIENTAL**

*Algebra vectorial y matricial. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales: método de las diferencias finitas.*

### **CAPITULO 6. MODELOS DE TRANSFERENCIA AIRE-AGUA**

*Transferencia de gases y líquidos en bahías y ríos. Transferencia de químicos en la interfase aire-agua de lagos y océanos. Transferencia de calor en la interfase aire-agua.*

### **CAPITULO 7. MODELOS DE TRANSFERENCIA AGUA-SUELO**

*Transporte de químicos en el fondo de corrientes de agua: ríos, riachuelos. Transporte de químicos en el fondo de depósitos de agua estáticos: pantanos, lagunas, lagos. Transporte de químicos en el fondo de estuarios y océanos.*

**Sesión Práctica No. 1:** *Introducción a Maple V o SciLab. Características del paquete computacional. Manejo de variables escalares, vectoriales, matriciales. Operaciones Matemáticas Básicas para arreglos de variables. Herramientas para la representación gráfica en 2D y 3D. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales.*

**Sesión Práctica No. 2:** *Introducción a Matlab o SciLab. Características del paquete computacional. Manejo de variables escalares, vectoriales, matriciales. Operaciones Matemáticas Básicas para arreglos de variables. Herramientas para la representación gráfica en 2D y 3D. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales.*

**Sesión Práctica No. 3:** *Resolución de las ecuaciones involucradas en el estudio de la cinética y equilibrio químico en sistemas simples a través de Scilab, Maple V y/o Matlab.*

**Sesión Práctica No. 4:** *Resolución de las leyes de difusión en sistemas simples a través de SciLab, Maple V y/o Matlab.*

**Sesión Práctica No. 5:** *Programación de rutinas para la estimación de propiedades físico-químicas de compuestos orgánicos: solubilidad en fase acuosa, presión de vapor, difusividad molecular para gases, líquidos y sólidos en función de la temperatura.*

**Sesión Práctica No. 6:** *Programación de rutinas para la estimación de propiedades físico-químicas de compuestos orgánicos: constantes de equilibrio para la distribución de compuestos químicos en las interfases aire-agua, aire- solvente(s) orgánico(s), agua-solvente(s) orgánico(s)*

**Sesión Práctica No. 7:** *Programación de rutinas para la estimación de propiedades físico-químicas de compuestos orgánicos: constantes de equilibrio para la distribución de compuestos químicos en las interfases agua-materia orgánica en suelo.*

**Sesión Práctica No. 8-9:** *Uso del Programa LEVEL I Fugacity-Based Environmental Equilibrium Partitioning Model (FBEEP-Model) desarrollado por el Centro de Modelado Ambiental de la Universidad de Trent, Canada.*

**Sesión Práctica No. 10-11:** *Uso del Programa LEVEL II (FBEEP-Model)*

**Sesión Práctica No. 12-13:** *Uso del Programa LEVEL III (FBEEP-Model)*

**Sesión Práctica No. 14:** *Aplicación de SciLab Matlab y MAPLE V para la resolución de un caso problema*

## **6. METODOLOGIA**

*El contenido teórico del curso será impartido bajo la modalidad de clases en sesiones de dos horas semanales. Cada semana se realizarán sesiones de trabajo de dos horas en el laboratorio de computación para la puesta en práctica de los conceptos*

*impartidos en clases. El número de sesiones prácticas se plantea en base a un semestre normal de 18 semanas.*

## **7. RECURSOS**

*Pizarra acrílica, marcadores. Computador y video-beam. Paquetes computacionales para la resolución y creación de modelos matemáticos, graficación y almacenamiento de datos.*

## **8. EVALUACION**

- *Exámenes parciales teóricos 40% de la nota definitiva*
- *Exámenes parciales prácticos 40% de la nota definitiva*
- *Trabajo final 20 % de la nota definitiva*

## **9. BIBLIOGRAFIA.**

*Thibodeaux, Louis. J. “Environmental Chemodynamics”. 2<sup>da</sup> ed. John Wiley & Sons, Inc. Canadá, 1996. ISBN: 0-471-61295-2*

*Ramaswani, Anu, Jana B. Milford y Mitchell J. Small. “Integrated Environmental Modeling: Pollutant Transport, Fate, and Risk in the Environment”. John Wiley & Sons, Inc. Canadá, 2005. ISBN: 0-471-35953-x*

*Schwarzenbach, Ren'e P., Philip M. Gschwend y Dieter M. Imboden. “Environmental Organic Chemistry”. John Wiley & Sons, Inc. Canadá, 1993. ISBN: 0-471-83941-8*

*Coughtrey, Michelle H. Martin, y M. H. Unsworth. “Pollutant transport and fate in ecosystems”. Blackwell Scientific Inc., Oxford, Melbourne, 1987 ISBN: 978-0632016273*

*Bockris, J. O'M. “Environmental Chemistry”. Springer, New York, USA, ISBN: 1977 0-306-30869-X*

*Moore, John W. “Environmental Chemistry”. 2<sup>da</sup> ed. John Wiley & Sons Inc, New York, USA, 1988 ISBN: 978-0471873839*

*R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot. “Transport Phenomena”. 2<sup>da</sup> ed. John Wiley & Sons Inc, New York, USA, 2001 ISBN: 978-0471410775*

## **10. VIGENCIA**

*Desde: Semestre U-2009*