

# HIDROLOGÍA APLICADA

## TEMA 6. MODELOS HIDROGEOQUÍMICOS



**Estilita Ruiz Romera**  
**Miren Martínez Santos**

## **TEMA 6. MODELOS HIDROGEOQUÍMICOS**

### **6.1. INTRODUCCIÓN A LA MODELIZACIÓN HIDROGEOQUÍMICA**

La modelización geoquímica es la aplicación de principios físico-químicos a la interpretación de sistemas hidrogeoquímicos. Empezó hace más de 30 años como un intento de aplicar técnicas más cuantitativas en la interpretación de las interacciones naturales roca-agua. Puede decirse que los orígenes de la modelización geoquímica se sitúan en tres trabajos clásicos. El primero (Garrels y Thompson, 1962), presenta el modelo termodinámico para la distribución de especies acuosas en el agua de mar; este modelo permitió, por vez primera, la predicción del estado de saturación mineral en una solución de mezcla electrolítica compleja; el segundo (Garrels y Mackenzie, 1967) sentó las bases de la aproximación inversa con un trabajo en el que se utilizan los datos de composición de aguas para construir las reacciones de «meteorización inversa» con objeto de describir el proceso de meteorización de un granito; por último, Helgeson (1968) presenta el armazón teórico de la primera simulación directa de reacciones geoquímicas.

El objetivo de la modelización geoquímica es crear o idear modelos teóricos de reacción capaces de explicar lo observado en el agua y las rocas. Es decir, consiste en utilizar los datos disponibles (análisis químicos de la fase acuosa, hidrogeología del sistema, mineralogía, composición de gases, datos isotópicos...) para intentar determinar: a) qué reacciones químicas han ocurrido; b) en qué medida han tenido lugar; c) las condiciones bajo las cuales ocurrieron (sistema abierto vs cerrado, equilibrio vs desequilibrio, temperatura constante vs variable...); y d) cómo variará la calidad de las aguas y la mineralogía en respuesta a los procesos naturales y a las perturbaciones en el sistema.

Un modelo es la representación simplificada de la realidad. Se reduce la complejidad del sistema natural a niveles de abstracción adecuados. La composición química del agua y de los suelos es variable y sujeta a procesos heterogéneos, cada uno de ellos controlados por una gran cantidad de factores. Es por ello que tratar de explicarla y de predecir su comportamiento es una tarea ardua, sobre todo como consecuencia de la cantidad de cálculos que están involucrados. A partir del desarrollo de modelos, esta tarea se ha visto considerablemente simplificada.

Los modelos hidrogeoquímicos se emplean fundamentalmente para predecir la distribución de las diferentes especies químicas presentes en una disolución acuosa,

así como la transferencia de materia que se produce al poner en contacto diferentes fases.

El empleo de un modelo hidrogeoquímico permite una mayor comprensión del funcionamiento de sistemas complejos pudiendo predecir el transporte y especiación metálica en diferentes fases y evitar o minimizar impactos adversos, entre otros. Además, absorbe la información procedente de los ensayos experimentales, que será esencial para la validación del modelo.

## 6.2. TIPOS DE MODELOS HIDROGEOQUÍMICOS

Los códigos empleados para estos fines se pueden englobar dentro de dos grandes grupos. Por una parte se consideran los denominados *códigos estáticos* o *códigos de equilibrio*, que definen básicamente la distribución de las diferentes especies químicas en función de su solubilidad en la fase acuosa en un momento de tiempo determinado; de tal manera que es posible predecir la distribución de un determinado contaminante en cualquier punto a lo largo del curso de agua o del acuífero. Estiman las concentraciones y/o actividades correspondientes a las diferentes especies químicas presentes en la disolución, y son capaces de determinar los índices de saturación para cada especie química. La hipótesis de partida para este tipo de códigos supone que las especies químicas disueltas en la fase acuosa se encuentran en equilibrio homogéneo, aunque la disolución en su conjunto no esté en equilibrio con otras fases presentes, como puedan ser las diferentes especies químicas que constituyen un suelo o cualquier otra fase sólida que se encuentre en contacto con la fase acuosa original formando un equilibrio heterogéneo. Aunque en la naturaleza no existan situaciones de equilibrio, estos modelos constituyen una herramienta útil para la interpretación de los fenómenos observables.

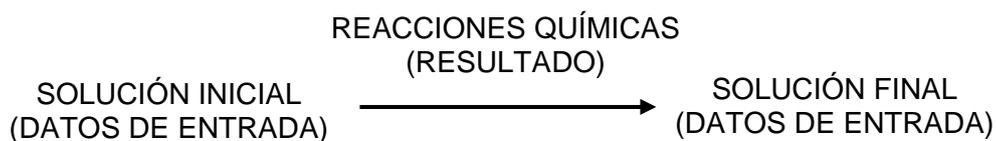
El segundo grupo de modelos es el de los denominados *códigos dinámicos* o *de etapas de reacción*. Estos definen la distribución de las diferentes especies químicas teniendo en cuenta las diferentes etapas de reacción presentes en el medio y también se conocen como códigos de evolución geoquímica. Estos permiten plantear problemas de equilibrio químico para las diferentes especies químicas presentes en sistemas heterogéneos multicomponentes, pudiendo abordar el estudio de la transferencia de materia entre dos o más fases del sistema agua - suelo. Asimismo, permiten tratar cuestiones como el equilibrio de precipitación o la solubilidad de las posibles especies sólidas, así como la influencia de los cambios de presión y temperatura en la composición de la disolución. Este tipo de sistemas se puede

enmarcar dentro de la termodinámica de procesos irreversibles.

Los cálculos geoquímicos que realizan los modelos hidrogeoquímicos están basados en el cumplimiento de las ecuaciones de conservación de materia y en los principios que rigen el equilibrio químico. Básicamente, estos códigos trabajan en dos líneas asociadas en serie-paralelo. La primera serie de cálculos está constituida por ciertos algoritmos numéricos capaces de ajustar los datos experimentales a modelos matemáticos capaces de simular el comportamiento de los sistemas, mientras que la segunda línea de trabajo consiste en un método de cálculo capaz de estimar propiedades termodinámicas a partir de una amplia base de datos termodinámica que puede ir ampliándose.

Al igual que en otros ámbitos de la simulación numérica, actualmente existen dos tipos de modelos para describir reacciones hidrogeoquímicas: *modelos directos* y *modelos inversos*.

Los modelos inversos o de balance (Figura 6.1) son aquellos que calculan las reacciones químicas netas que han ocurrido en el medio físico entre dos puntos situados sobre una línea de flujo y en los cuáles se conoce la composición del agua. Se parte de la composición de una solución inicial y una solución final conocidas, así como de uno o varios conjuntos de reacciones plausibles (modelo hidrogeoquímico conceptual) que puede tener lugar en el sistema considerado. El programa calcula la cantidad neta de masa transferida entre las distintas fases del medio (líquida, sólida y gaseosa) para cada una de las reacciones especificadas.

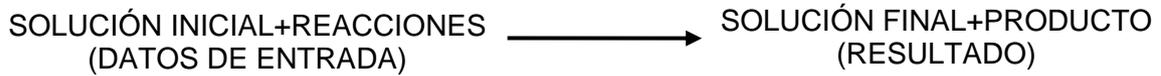


**Figura 6.1:** Esquema de modelo inverso.

También en este caso es posible la simulación de mezcla de aguas mediante la incorporación de dos soluciones iniciales y la indicación de que la proporción de mezcla debe obtenerse sobre la base de un componente, en general considerado conservativo.

Los modelos directos (Figura 6.2) son aquellos en los cuales conocida la composición inicial de una solución y establecidas las reacciones hidrogeoquímicas que se piensa tienen o tendrán lugar en el sistema, se obtiene como resultado una solución final que

es el producto de esas reacciones. Permiten hacer predicciones acerca del funcionamiento de un sistema y son especialmente útiles en el caso de situaciones hipotéticas o con un elevado nivel de incertidumbre respecto a las características reales del medio.



**Figura 6.2:** Esquema de modelo directo.

Dentro de este esquema se incluye también la simulación de mezcla de aguas de diferente composición. En este caso serán dos las soluciones iniciales conocidas, y entre los procesos debe incluirse la proporción y los pasos en que debe establecerse la mezcla.

En general la aplicación de uno u otro tipo de modelo depende de cuál sea el objetivo del estudio. Los modelos directos son de gran utilidad cuando se desea efectuar predicciones sobre cómo variará la composición del agua y la mineralogía del medio en respuesta a procesos naturales y perturbaciones del sistema, o para conocer las condiciones bajo las cuáles una reacción ha tenido lugar (sistema abierto o cerrado, equilibrio o no equilibrio, temperatura constante o variable...). La fiabilidad de las predicciones requiere un conocimiento elevado del modelo hidrogeoquímico conceptual, por cuanto debe indicarse no sólo las reacciones probables, sino también la magnitud de las mismas. No obstante, en el caso de investigar medios poco conocidos, los modelos directos son tanto más útiles cuanto mayor es el grado de incertidumbre sobre el medio real, es decir, cuanto más hipotético es el caso simulado. De esta forma se puede definir con todo el detalle que se desee el/los modelos hidrogeoquímicos conceptuales a verificar.

Los modelos inversos resultan de mayor utilidad cuando el conocimiento del medio reactivo es mayor y se trata de cuantificar procesos que sean plausibles para explicar los cambios de composición observados sobre una línea de flujo. Los programas de modelación inversa no proporcionan soluciones únicas, dependiendo entonces la elección de la/las más probables del grado de conocimiento que se tenga de las condiciones reales del medio estudiado, es decir de la correcta formulación del modelo conceptual.

Independientemente del tipo de modelo utilizado (directo o inverso) es necesario conocer en cierto grado cuáles son las fases minerales presentes en el medio de estudio (acuífero, río, etc.) y de las características de los probables intercambiadores, tales como las mediciones de pH, redox, temperatura, etc.

Para la elaboración de modelos de especiación-solubilidad y para las pautas de reacción, existen los siguientes códigos de modelización hidrogeoquímica:

**Tabla 6.1.** Códigos numéricos

MODELO	UTILIDAD	OBSERVACIONES	AUTORES
WATEQ4F	Sistema estático	Especiación - solubilidad	Ball y Nordstrom, 1991
PHREEQC	Sistema dinámico	Especiación – solubilidad Pautas de reacción Balance de masa Transporte reactivo	Parkhurst y Appelo, 1999
NETPATH	Sistema dinámico	Balance de masa	Plummer et. al., 1991
EQ6	Sistema dinámico	Pautas de reacción	Wolery y Daveler, 1989
MINTEQA2	Sistema dinámico	Especiación - solubilidad	Allison et. al., 1990
WASP	Sistema dinámico	Especiación - solubilidad	Ambrose et. al., 1988

Uno de los códigos más ampliamente utilizado entre la comunidad científica es el sistema dinámico PHREEQC, ya que es el que presenta más posibilidades. Por tanto, en este tema sobre modelos hidrogeoquímicos nos centraremos especialmente en él.

### 6.2.1. Código PHREEQC

El código PHREEQC ha sido desarrollado en el *U.S. Geological Survey* (Parkhurst, 1995; Parkhurst y Appelo, 1999). El código es de dominio público y puede obtenerse a través de la página web que el *U.S. Geological Survey* tiene dedicada al programa. En esta página web se proporciona una información muy completa sobre el código, que incluye las instrucciones para la instalación del programa, su manual de usuario (Parkhurst y Appelo, 1999) y varias secciones adicionales que incluyen preguntas frecuentes sobre PHREEQC, referencias bibliográficas básicas sobre la utilización del programa, errores que se van localizando y corrigiendo y, finalmente, una sección en

la que se señalan las mejoras, correcciones y nuevas versiones del código que van apareciendo.

### **6.2.1.1. Capacidades del cálculo geoquímico**

A continuación, se analizarán los tres tipos fundamentales de cálculos que puede realizar PHREEQC: cálculos de pautas de reacción, cálculos de transporte reactivo y cálculos de balance de masas.

#### **a) Cálculos geoquímicos de pautas de reacción**

Como todos los códigos de pautas de reacción, PHREEQC puede realizar también cálculos de especiación-solubilidad como una opción adicional. Respecto a los más complejos cálculos de pautas de reacción, PHREEQC puede simular la evolución de sistemas de interacción agua-roca en los que se producen reacciones homogéneas de especiación, de óxido-reducción (homogéneas y heterogéneas), de intercambio iónico, de adsorción, de disolución/exolución de gases y de disolución-precipitación de fases minerales puras o de soluciones sólidas.

El tratamiento de estos procesos puede incluirse en simulaciones complejas de mezcla de aguas, titración, cambio de temperatura, evaporación o precipitación-disolución mineral como fenómenos irreversibles desencadenantes de la evolución del sistema geoquímico. No obstante, también pueden realizarse cálculos más simples como equilibrar una solución con un determinado mineral o minerales (o con un determinado valor de índice de saturación de los mismos), calcular la magnitud de una determinada reacción irreversible para que se alcance el equilibrio con un determinado mineral, equilibrar la solución con una determinada presión parcial de CO<sub>2</sub>, etc., cálculos que constituyen un buen apoyo en el momento de realizar simulaciones más complejas.

El planteamiento de las reacciones químicas se realiza mediante un conjunto de especies básicas o maestras (una por cada elemento químico o por cada valencia de un elemento) a partir del cual se definen todo el resto de especies disueltas, fases sólidas, complejos superficiales y complejos de intercambio. Todas estas reacciones (homogéneas y heterogéneas) son descritas termodinámicamente mediante las correspondientes leyes de acción de masa.

Una característica interesante de PHREEQC es que permite al usuario elegir cualquier especie de la base de datos para la construcción de la reacción. El código posee un algoritmo que reescribe la reacción de acuerdo a las especies básicas consideradas

internamente. Por otro lado, también dispone de un algoritmo para modificar el conjunto de especies primarias (cambio de base o *basis switching*) de forma automatizada si durante la resolución del problema alguna de esas especies alcanza concentraciones demasiado bajas. Este algoritmo agiliza el cálculo y evita problemas numéricos, especialmente, en la simulación de procesos en los que intervienen reacciones redox.

- **Modelo químico**

PHREEQC incluye un modelo químico basado en la Teoría de Asociación Iónica en el que se emplean distintas formulaciones de la ecuación de Debye-Hückel para el cálculo de los coeficientes de actividad de las especies cargadas. Estas formulaciones son análogas a las manejadas en otros códigos geoquímicos del *U.S. Geological Survey* e incluyen la ecuación de Debye-Hückel de tipo WATEQ (Truesdell y Jones, 1974), la ecuación de Debye-Hückel ampliada y la ecuación de Davies (1962).

- **Procesos redox**

Los procesos redox en PHREEQC están formalmente descritos mediante reacciones con intercambio de electrones cuyas leyes de acción de masa se definen en función del concepto de  $pe$  (aunque se incluye la equivalencia necesaria para traducir los valores de este parámetro al más conocido valor de Eh). En los cálculos simples de especiación-solubilidad la distribución de estos elementos puede obtenerse suponiendo una situación de equilibrio termodinámico entre todos los pares redox de la solución o bien considerando situaciones de equilibrio parcial (o desequilibrio) a través de un tratamiento independizado de pares redox.

En la aproximación de equilibrio, a partir de un valor de  $pe$  o Eh medido en la solución, o del potencial de un determinado par redox elegido por el usuario, se calcula la distribución de especies del resto de elementos redox. En la aproximación de desequilibrio, el usuario puede asignar el potencial de cualquier par redox al cálculo de los elementos redox que seleccione. De esta forma, la distribución de un determinado elemento redox puede estar controlada por el potencial de un determinado par (no necesariamente del mismo elemento) mientras que la del resto puede estarlo por otros pares, por un único par, o por el valor de Eh medido en la solución.

Por otro lado, PHREEQC permite realizar aproximaciones cinéticas al tratamiento de los procesos redox en solución, modificando su base de datos y si el usuario dispone de los datos necesarios para definir las leyes cinéticas correspondientes.

- **Procesos de intercambio iónico**

Las reacciones de intercambio iónico en PHREEQC son escritas como semireacciones entre especies en solución y una ficticia posición de coordinación no ocupada para cada intercambiador. Estas reacciones son descritas por leyes de acción de masa asumiendo que la actividad termodinámica de una especie de intercambio es igual a su fracción equivalente (convenio de Gaines-Thomas; no obstante también puede utilizarse el convenio de Gapon modificando las reacciones en las bases de datos).

Opcionalmente, las fracciones equivalentes pueden ser corregidas (Appelo y Postman, 1994) para obtener la actividad de una especie de intercambio, multiplicándolas por un coeficiente de actividad calculado mediante la ecuación de Debye-Hückel extendida, la de tipo WATEQ o la de Davies (1962).

PHREEQC puede tratar situaciones de equilibrio entre la solución acuosa y múltiples intercambiadores simultáneamente. El número de posiciones de intercambio (número total de moles de estas posiciones) puede mantenerse constante a lo largo de la simulación. Pero, además, PHREEQC permite variar el número de estas posiciones conforme se producen procesos de precipitación-disolución que afecten a las fases minerales puras cuya superficie interviene en el proceso de intercambio. El usuario puede elegir entre que esa variación sea proporcional al número de moles de la fase pura o proporcional a los moles de un reactante controlado cinéticamente.

- **Procesos de adsorción**

PHREEQC incluye tres modelos para tratar este tipo de procesos de superficie: el Modelo Generalizado de Doble Capa de Dzombak y Morel (1990), el modelo de Doble Capa de Borkovec y Westall (1983) con cálculo explícito de la capa difusa y el modelo de coordinación superficial sin corrección electrostática propuesto por Davis y Kent (1990). Los procesos de adsorción según las clásicas isothermas de Langmuir o de Freundlich pueden ser simulados como casos especiales de este último modelo no electrostático.

- b) Cálculos de transporte reactivo y transferencia de calor**

El modelo de flujo-transporte incluido en PHREEQC se basa en el del código PHREEQM (Appelo y Postma, 1993) y le permite simular procesos de transporte reactivo unidimensionales en medios porosos (de porosidad constante), saturados, heterogéneos, asociados a flujos monofásicos, en condiciones no isothermas

(resolviendo explícitamente la ecuación de transferencia de calor) y considerando procesos de advección, dispersión y difusión como mecanismos de transporte de solutos (el valor de los coeficientes de difusión es el mismo para todas las especies disueltas). PHREEQC no resuelve la ecuación de flujo y, por tanto, no puede realizar cálculos de flujo hidrodinámico. Ello implica que el usuario debe suministrar, como datos de entrada, el campo de velocidades sobre el que realizar los cálculos de transporte reactivo.

### c) Cálculos de balance de masa

PHREEQC puede realizar aproximaciones de Problema Inverso mediante cálculos de balance de masa similares a los que realiza el código NETPATH (Plummer *et al.*, 1991, 1994). Puede realizar, por tanto, los dos tipos básicos de cálculo referidos a:

- 1) Los cambios en la composición química de las aguas que evolucionan a lo largo de una pauta de flujo.
- 2) Las proporciones de mezcla y procesos heterogéneos de reacción que se producen en sistemas hidrológicos dominados por procesos de mezcla.

#### 6.2.1.2. Bases de datos termodinámicos

PHREEQC dispone en la actualidad de cuatro bases de datos termodinámicos diferentes que pueden ser fácilmente seleccionadas por el usuario para realizar, por ejemplo, una misma simulación con cualquiera de ellas. Estas bases de datos son:

- **phreeqc.dat**, derivada fundamentalmente de la incluida en el código PHREEQE (Parkhurst *et al.*, 1990). Contiene 26 componentes que se distribuyen en 151 especies acuosas (con 9 pares redox), 57 minerales y 8 gases, siendo aplicable a un rango de temperaturas entre 0 y 100 °C. A esta base de datos se han añadido, por un lado, las constantes de coordinación superficial propuestas por Dzombak and Morel (1990) para la realización de los cálculos de superficie mediante el Modelo Generalizado de Doble Capa; por otro, se han incorporado las constantes de equilibrio propuestas por Appelo y Postma (1993) para el tratamiento de las reacciones de intercambio iónico.

- **wateq4f.dat**, base de datos procedente del código de especiación-solubilidad WATEQ4F. Contiene 36 componentes con 305 especies acuosas (17 pares redox), 309 minerales y 8 gases, permitiendo efectuar cálculos en un rango de temperaturas entre 0 y 100 °C. A esta base de datos se han añadido las mismas constantes de

coordinación superficial y de intercambio iónico incorporadas en phreeqc.dat.

- **llnl.dat**, base de datos correspondiente a la versión thermo.com.V8.R6.230, preparada por Jim Johnson en el Lawrence Livermore National Laboratory, incorporada en el código *Geochemist's Workbench* y consistente con la base de datos manejada por EQ3/6. También cuenta con la incorporación de las constantes de equilibrio necesarias para el tratamiento de los procesos de superficie e intercambio iónico.

- **Minteq.dat**, base de datos original del código MINTEQA2 (Allison *et al.*, 1990). Contiene más de 70 componentes (inorgánicos y orgánicos) distribuidos en más de 800 especies acuosas, 500 minerales, 13 gases y 42 especies superficiales, permitiendo realizar cálculos en el intervalo de 0 a 100 °C. A diferencia de las anteriores bases de datos, minteq.dat utiliza las constantes de coordinación superficial propuestas originalmente en MINTQA2 para la realización de los cálculos de superficie.

### 6.2.1.3. Método de resolución numérica

Las ecuaciones de gobierno manejadas por PHREEQC para la resolución de cálculos de pautas de reacción constituyen un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que es resuelto mediante el método iterativo de Newton-Raphson.

El método iterativo de Newton-Raphson se encuentra ayudado por la utilización de distinto tipo de estrategias para la selección de las semillas (estimaciones iniciales) de las incógnitas (Parkhurst y Appelo, 1999) y por una técnica de optimización (Barrodale y Roberts, 1980) para evitar la presencia de matrices singulares. Mediante esta técnica, durante el proceso de cálculo iterativo de Newton-Raphson, algunas de las ecuaciones de gobierno son incluidas como funciones objetivo en vez de cómo meras igualdades. Cuando los residuales de todas las funciones o ecuaciones de gobierno se hacen iguales a cero se ha resuelto el sistema y termina el proceso iterativo.

Si se definen cálculos cinéticos, las leyes de velocidad son integradas mediante un método de Runge–Kutta con un algoritmo de tamaño de paso de tiempo automatizado y el sistema en equilibrio vuelve a recalcularse en cada paso de tiempo.

Para la resolución de la ecuación de transporte reactivo PHREEQC se puede considerar distinto tipo de condiciones de contorno para la primera y última celda del dominio unidimensional definido, incluyendo condiciones de concentración prescrita,

de flujo prescrito y sin flujo. Estas ecuaciones de gobierno son resueltas mediante una aproximación explícita de diferencias finitas hacia delante para el tiempo, centrada en el espacio para los términos difusivos-dispersivos y hacia delante para los advectivos.

Por último, las ecuaciones de balance fundamentales que gobiernan el cálculo de Problema Inverso realizado por PHREEQC. La formulación de este tipo de cálculo produce un sistema de ecuaciones constituido por igualdades y desigualdades lineales que son resueltas mediante un algoritmo de optimización desarrollado por Barrodale y Roberts (1980) y basado en el método Simplex.

#### **6.2.1.4. Interfaz de usuario**

PHREEQC constituye uno de los códigos de modelización geoquímica actualmente disponibles con mayor número de ofertas en cuanto a su interfaz de usuario, al menos en lo que respecta a las versiones desarrolladas para ordenadores personales con sistemas operativos WINDOWS. Algunas de estas interfaces incluyen opciones para el post-procesado gráfico de resultados y existen, además, programas diseñados específicamente para este tipo de tratamiento, como PHRQCGRF (Vrabel y Glynn, 1998).

En la actualidad, el usuario dispone de tres versiones con distintas interfaces para trabajar en ese tipo de entornos, todas ellas desarrolladas en torno a la última versión disponible del código y disponibles en la página web del *U.S. Geological Survey*:

- La denominada versión “*batch*” diseñada para funcionar con operativos DOS (o a través de la interfaz de comandos de WINDOWS).
- La versión PHREEQCI (Charlton *et al.*, 1997) con una interfaz gráfica de usuario desarrollada para entornos con WINDOWS (de 32 bits).
- La versión denominada *PHREEQC for Windows* desarrollada por Vincent Post en la Universidad de Amsterdam, también con una interfaz gráfica para entornos WINDOWS (de 32 bits).

#### **6.2.1.5. Previsiones de desarrollo**

Desde su aparición oficial en 1995 (Parkhurst, 1995), PHREEQC ha sido uno de los códigos mantenidos en el *U.S. Geological Survey* más activamente desarrollados, con progresivos refinamientos, ampliaciones de capacidades de cálculo, aumento de las bases de datos termodinámicos disponibles para el código, etc. Lo que hace esperable

que continúe la política de mantenimiento y desarrollo de códigos seguida en ese organismo.

Por otro lado, PHREEQC ha sido empleado como módulo geoquímico del código de flujo y transporte reactivo PHAST (Parkhurst *et al.*, 2001), actualmente en fase de desarrollo dentro del *U.S. Geological Survey*.

Todo ello asegura que, aunque no se indican explícitamente previsiones de desarrollo concretas para PHREEQC, el mantenimiento y refinamiento del código va a continuar dentro de la política de distribución gratuita del *U.S. Geological Survey*.

#### **6.2.1.6. Códigos relacionados**

El mencionado código PHAST (Parkhurst *et al.*, 2001) para la realización de cálculos de flujo, transferencia de calor y transporte reactivo constituye el código relacionado de forma más evidente con PHREEQC. PHAST es un código de tipo modular en el que se acopla PHREEQC, como módulo geoquímico, con el código de flujo, transporte de solutos y transferencia de calor HST3D, también desarrollado en el *U.S. Geological Survey*. La creación de este nuevo código puede ser contemplada como una ampliación de las capacidades de cálculo del entorno de modelización geoquímica que representa PHREEQC.

No obstante, PHREEQC ya ha sido utilizado como módulo geoquímico en códigos de flujo o transporte reactivo de reciente aparición, como TReAC o CoTReM y está siendo utilizado en otros todavía en fase de desarrollo como PHT3D.

#### **6.2.1.7. Consideraciones**

PHREEQC está llamado a ser, en los próximos años, uno de los códigos de más amplia difusión y utilización, tanto en el ámbito científico como de la evaluación de la seguridad. A ello contribuyen varios aspectos destacados del código.

En primer lugar, PHREEQC no es realmente un único código de modelización geoquímica sino que representa una síntesis de distintos tipos de cálculos (cálculos de especiación-solubilidad, pautas de reacción, transporte reactivo y balance de masas), tanto para aproximaciones de Problema Directo como Inverso, normalmente incluidos en códigos independientes específicamente desarrollados para ello. Desde esta perspectiva, constituye un completo entorno de modelización geoquímica que, en la actualidad, está siendo completado para la realización de cálculos complejos de flujo y

transporte reactivo mediante el código PHAST (que incluye PHREEQC como módulo geoquímico).

En segundo lugar, la disponibilidad de las bases de datos termodinámicos de otros códigos (incluye las de los códigos WATEQ4F, MINTEQA2, PHREEQE y la manejada por códigos como EQ3/6 o *Geochemis't Workbench*) suministra la posibilidad de reproducir casi la práctica totalidad de los cálculos asequibles con esos códigos dentro de un único entorno de trabajo.

Por otro lado, PHREEQC dispone de un amplio número de interfaces, con filosofías de trabajo marcadamente distintas, para los ordenadores más ampliamente difundidos como son los de tipo PC con sistemas operativos WINDOWS.

Y, por último, se trata de un código desarrollado en el *U.S. Geological Survey*, organismo caracterizado por una continuada política de mantenimiento, mejora y libre distribución de sus códigos.

**Enlace de descarga del programa Phreeqc y su manual de usuario:**

[http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC\\_coupled/phreeqc/](http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/)