

DESCRIPCIÓN DEL MODELO HIDRUS-1D

1. Generalidades del Modelo

El programa HYDRUS es una herramienta de simulación numérica utilizada para modelar el flujo unidimensional de agua, el transporte de un soluto y el movimiento de calor en medios porosos variablemente saturados. Su aplicación es común en estudios de dinámica del agua en suelos, tratamiento de aguas residuales y evaluación de riesgos de contaminación de acuíferos.

Existen versiones más avanzadas del programa, como HYDRUS-2D y HYDRUS-3D, que permiten resolver estos procesos en espacios bidimensionales y tridimensionales respectivamente. Estas versiones están diseñadas para trabajar con geometrías complejas, incluyendo dominios hexaédricos, lo que amplía considerablemente las posibilidades de análisis espacial del comportamiento de los flujos y los solutos en el suelo.

HYDRUS modela el flujo de agua a través del suelo usando la ecuación de Richards, mientras que el transporte de solutos y el calor se resuelven mediante ecuaciones de advección, dispersión y convección. Esta aproximación permite simular procesos complejos de interacción entre el agua, los contaminantes y el medio poroso.

Entre sus capacidades avanzadas se incluye la posibilidad de simular histéresis tanto en la retención suelo-agua como en la función de conductividad hidráulica, así como el escalamiento de funciones hidráulicas para representar cambios continuos en las propiedades del suelo. También permite considerar diferentes condiciones de borde, incluyendo opciones alternativas de drenaje y entrada de flujo.

HYDRUS se basa en el desarrollo de modelos previos reconocidos en el ámbito científico, como WORM (Van Genuchten, 1987), SWM_II (Vogel, 1987) y SWMS_2D

(Šimůnek et al., 1994), además de las primeras versiones de HYDRUS. Gracias a esta evolución, el programa ha sido ampliamente validado y es actualmente una de las herramientas más utilizadas en estudios de transporte de contaminantes en suelos y evaluación de la vulnerabilidad de acuíferos.

2. Discretización de Espacio y Tiempo de la Ecuación de Flujo

El modelo HYDRUS emplea un esquema de elementos finitos de masa agrupada para discretizar la ecuación de Richards en su forma mixta. Para el tiempo, utiliza el método de Crank-Nicolson, que ofrece estabilidad y precisión al resolver el flujo de agua en suelos no saturados. La ecuación resultante es la siguiente:

Ecuación 1. Método de Crank-Nicolson

$$\frac{(\theta_i^{j+1,k+1} - \theta_i^j)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left(K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,k} * \frac{(h_{i+1}^{j+1,k+1} - h_i^{j+1,k+1})}{\Delta z_i} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,k} * \frac{(h_i^{j+1,k+1} - h_{i-1}^{j+1,k+1})}{\Delta z_{i-1}} \right) + \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,k} - K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,k}}{\Delta z} \cos \alpha - S_i^j$$

Ecuación 1.

Fuente: (Consultoria Ambiental, 2025) de método de Crank-Nicolson

Y a su vez de las siguientes ecuaciones:

Ecuación 2. Ecuaciones del Método de Crank-Nicolson

$$\Delta t = t^{j+1} - t^j \quad \text{Ecuación 2.}$$

$$\Delta z = \frac{(z_{i+1} - z_{i-1})}{2} \quad \text{Ecuación 3.}$$

$$\Delta z_i = z_{i+1} - z_i \quad \text{Ecuación 4.}$$

$$\Delta z_{i-1} = z_i - z_{i-1} \quad \text{Ecuación 5.}$$

$$K_{i+\frac{1}{2}}^{j+1,k} = \frac{(K_{i+1}^{j+1,k} + K_i^{j+1,k})}{2} \quad \text{Ecuación 6.}$$

$$K_{i-\frac{1}{2}}^{j+1,k} = \frac{(K_i^{j+1,k} + K_{i-1}^{j+1,k})}{2} \quad \text{Ecuación 7.}$$

Fuente: (Consultoria Ambiental, 2025) del método de Crank-Nicolson

Donde los subíndices $(i+1 \text{ e } i-1)$ indican la posición en la malla de la diferencia finita, los subíndices $(k \text{ y } k+1)$ denotan el paso actual y anterior de los niveles de iteración, respectivamente; y los subíndices $(j \text{ y } j+1)$, representan el paso actual y anterior en los niveles de tiempo. La *Ecuación 1* está basada en una discretización implícita completa de la derivada del tiempo.

Utilizando el método de conservación de masa propuesto por (Celia, et al., 1990) en el cual $\theta^{j+1,k+1}$ es expandido en una serie de Taylor truncada con respecto a h sobre el punto de expansión $h^{j+1,k}$ y un esquema de diferencia de tiempo de la Ecuación 1 se obtiene:

Ecuación 3. Ecuaciones del Método de conservación de masa

$$\frac{(\theta_i^{j+1,k+1} - \theta_i^j)}{\Delta t} = C_i^{j+1,k} \frac{(h_i^{j+1,k+1} - h_i^{j+1,k})}{\Delta t} + \frac{(\theta_i^{j+1,k+1} - \theta_i^j)}{\Delta t} \quad \text{Ecuación 8.}$$

Donde C_i representa el valor nodal de la capacidad de agua en el suelo [L^{-1}]:

$$C_i^{j+1,k} = \left. \frac{d\theta}{dh} \right|^{j+1,k} \quad \text{Ecuación 9.}$$

Este método ha demostrado excelentes resultados en términos de minimizar el error en el balance de masa. La derivación conduce a una ecuación matricial de la siguiente forma:

$$[P_w]^{j+1,k}\{h\}^{j+1,k+1} = \{F_w\}$$

Ecuación 10.

Donde $[P_w]$ es una matriz diagonal simétrica y tiene la forma:

$$[P_w] = \begin{bmatrix} d_1 & e_1 & 0 & \dots & & & & 0 \\ e_1 & d_2 & e_2 & 0 & & & & 0 \\ 0 & e_2 & d_3 & e_3 & 0 & & & 0 \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & & 0 & e_{N-3} & d_{N-2} & e_{N-2} & & 0 \\ 0 & & & 0 & e_{N-2} & d_{N-1} & e_{N-1} & \\ 0 & & & & 0 & e_{N-1} & d_N & \end{bmatrix}$$

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) de (Celia, et al., 1990)

3. Tratamiento de las Condiciones de Contorno de la Presión

Si una condición de contorno de primer tipo (condición Dirichlet) es especificada en la parte superior o inferior del suelo, entonces los términos d_1 o d_N son iguales a uno, e_1 y e_N se reducen a cero y f_1 o f_N son iguales a la altura de presión prescrita en h_0 . Es necesario realizar alguna acomodación en la matriz P_w para conservar la simetría.

4. Tratamiento para las Condiciones de Contorno de tipo Newman

Si una condición de contorno de tercer tipo (Newman) en el perfil inferior es especificada, entonces las entradas individuales son obtenidas por la Ley de Darcy.

Ecuación 4. Ecuaciones obtenidas por la Ley de Darcy

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial z} - K$$

Ecuación 11.

Tal que d_l y f_l en P_w alcancen los siguientes valores

$$d_1 = \frac{(K_1^{j+1,k} + K_2^{j+1,k})}{2\Delta z_1} \quad y \quad f_1 = \frac{(K_1^{j+1,k} + K_2^{j+1,k})}{2} + q_0^{j+1}$$

Ecuación 12.

Donde q_0 es prescrito en la condición de flujo inferior [LT^{-1}] y donde e_l es descrito anteriormente. Una forma de incorporar la condición de contorno de flujo en la parte superior del perfil del suelo es mediante una discretización de la ley de Darcy. No obstante, esta aproximación puede generar inestabilidad en la solución cuando el flujo en la superficie varía rápidamente en el tiempo. Para mejorar la estabilidad, es preferible discretizar la ecuación de balance de masa en lugar de la ley de Darcy.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial z} - S$$

Ecuación 13.

La discretización obtenida es:

$$\frac{(\theta_N^{j+1,k+1} - \theta_N^j)}{\Delta t} = \frac{(q_N^{j+1} - q_{N-\frac{1}{2}}^{j+1,k})}{\Delta z_{N-1}} - S_N^j$$

Ecuación 14.

Donde q_N es el flujo en el contorno de la superficie del suelo. La aplicación de una condición de contorno garantiza la conservación de la simetría en la matriz del sistema numérico.

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) de (Celia, et al., 1990)

Solución Numérica de la Ecuación de Transporte Convectivo Dispersivo

Para la resolución de la ecuación de transporte de solutos HYDRUS 1D aplica la ecuación CDE resolviéndola con el método de elementos finitos de Galerkin, el cual está sujeto a condiciones iniciales y de contorno apropiadas.

Ecuación 5. Método de elementos finitos de Galerkin

$$\frac{\partial \theta R_{k1} C_k}{\partial T} + \theta R_{k2} \frac{\partial C_k}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial z} \left(E_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) - \frac{\partial B_k C_k}{\partial z} + F_k C_k + G_k = 0 \quad k \in (1, n_s) \quad \text{Ecuación 15.}$$

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) del Método de elementos finitos de Galerkin

Dónde: E_k es el coeficiente de dispersión y B_k velocidad efectiva y los coeficientes F_k y G_k están definidos como:

Ecuación 6. Ecuaciones del Método de elementos finitos de Galerkin

Ecuación 16.

$$F_k(C_k) = -(\mu_{w,k} + \mu_{s,k})\theta - (\mu_{s,k} + \mu_{s,k})\rho f \frac{k_{s,k} C_k^{\beta_{k-1}}}{1 + \eta_k C_k^{\beta_k}} - (\mu_{g,k} + \mu_{g,k})a_v k_{g,k} - \omega_k \rho (1 - f) \frac{k_{s,k} C_k^{\beta_{k-1}}}{1 + \eta_k C_k^{\beta_k}}$$

$$G_1(C_1) = \gamma_{w,1}\theta + \gamma_{s,1}f\rho + \gamma_{g,1}a_v - r_{a,1} + |\omega_1 \rho S_1^k| - \rho f g_1(C_1) \quad \text{Ecuación 17.}$$

$$G_k(C_k) = \left(\mu_{w,k-1}\theta + \mu_{s,k-1}f\rho \frac{k_{s,k-1} C_{k-1}^{\beta_{k-1}-1}}{1 + \eta_{k-1} C_{k-1}^{\beta_{k-1}}} + \mu_{g,k-1}a_v k_{g,k-1} \right) C_{k-1} + \mu_{s,k-1}\rho S_{k-1}^k + \gamma_{w,k}\theta + \gamma_{s,k}f\rho + \gamma_{g,k}a_v - r_{a,k} + \omega_k \rho S_k^k - \rho f g_k(C_k) \quad k \in (2, n_s) \quad \text{Ecuación 18.}$$

g_k se tiene en cuenta para posibles cambios en los parámetros de absorción. El factor de retardo se divide de la ecuación de transporte en dos partes R_{k1} para la fase líquida y gaseosa, y R_{k2} para la fase sólida, tal como se muestra en la Ecuación 19.

$$R_{k1}(C_k) = 1 + \frac{a_v k_{g,k}}{\theta} \quad k \in (1, n_s) \quad \text{Ecuación 19.}$$

Los coeficientes de partición de los solutos utilizados en la modelación fueron obtenidos a partir de la revisión bibliográfica de estudios correspondientes a la evaluación del comportamiento de estos.

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) del Método de elementos finitos de Galerkin

5. Discretización Espacial

El método de elementos finitos de Galerkin asume que la variable dependiente es la función de concentración $C(z, T)$ y esta puede ser aproximada por una serie finita $C'(z, T)$ de la forma:

Ecuación 7. Ecuaciones del Método de elementos finitos de Galerkin - función de concentración $C(z, T)$

$$C'(x, T) = \sum_{m=1}^N \phi_m(z) C_m(T)$$

Ecuación 20.

Donde ϕ_m es una función de base lineal que cumple con la condición $\phi_m(z_n) = \delta_{nm}$ donde δ_{nm} es delta de Kronecker $\delta_{nm} = 1$ para $m = n$ y $\delta_{nm} = 0$ para $m \neq n$, C_m son coeficientes desconocidos que se encuentran en función del tiempo los cuales representan soluciones de la Ecuación 20 en los puntos nodales del elemento finito. N es el número total de puntos nodales.

Las funciones lineales bases tienen la siguiente forma:

$$\phi_1 = 1 - \xi \quad y \quad \phi_2 = \xi$$

Ecuación 21.

Donde ξ es la distancia en el sistema de coordenadas locales, para el sistema de coordenadas globales ξ es definido como:

$$\xi = \frac{z - z_1}{\Delta z} \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad \text{Ecuación 22.}$$

Donde $\Delta z = z_2 - z_1$ [L]. es el tamaño de un elemento finito la distancia entre los dos puntos nodales. La solución aproximada $C'(z, T)$ converge a la solución correcta $C(z, T)$ cuando el número de funciones bases N se incrementa.

La aplicación del método de Galerkin el cual postula que el operador diferencial asociado con la ecuación del transporte es ortogonal a cada una de las N funciones bases. Por consiguiente, se obtiene el siguiente sistema de N ecuaciones diferenciales en función del tiempo con N valores desconocidos $C_n(T)$:

$$\int_0^L \left[-\frac{\partial \theta R^1 C}{\partial T} - \theta R^2 \frac{\partial C}{\partial T} + \frac{\partial}{\partial z} \left(E \frac{\partial C}{\partial z} - BC \right) + FC + G \right] \phi_n dz = 0 \quad \text{Ecuación 23.}$$

Donde por conveniencia en la notación se redujo el índice k referente al k -ésima cadena de decaimiento. Integrando por partes los términos que contienen derivadas espaciales se obtiene:

$$\int_0^L \left[-\frac{\partial \theta R^1 C}{\partial T} - \theta R^2 \frac{\partial C}{\partial T} + FC + G \right] \phi_n dz - \int_0^L \left(E \frac{\partial C}{\partial z} - BC \right) \frac{\partial \phi_n}{\partial z} dz - q_{sL} \phi_n(L) + q_{s0} \phi_n(0) = 0 \quad \text{Ecuación 24.}$$

Donde q_{sL} y q_{s0} son los flujos de solutos a través de los contornos inferiores y superior respectivamente. Sustituyendo la Ecuación 24 $C(z, T)$ se obtiene:

$$\sum_e \int_0^{L_e} \left[-\frac{\partial \theta R^1 C_m}{\partial T} \phi_m - \theta R^2 \frac{\partial C_m}{\partial T} \phi_m - F C_m \phi_m + G \right] \phi_n dz - \sum_e \int_0^{L_e} \left(E C_m \frac{\partial \phi_m}{\partial z} - B C_m \phi_m \right) \frac{\partial \phi_n}{\partial z} dz - q_{sL} \phi_n(L) + q_{s0} \phi_n(0) = 0$$

Ecuación 25.

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) del Método de elementos finitos de Galerkin

6. Discretación en el Tiempo

El método de Galerkin es usado únicamente para la aproximación de las derivadas espaciales, las derivadas temporales son discretizadas por medio de diferencias finitas como lo siguiente:

Ecuación 8. Discretizadas por medio de diferencias finitas

$$\frac{[Q^1]^{j+1} \{C\}^{j+1} - [Q^1]^j \{C\}^j}{\Delta T} + [Q^1]^{j+\varepsilon} \frac{\{C\}^{j+1} - \{C\}^j}{\Delta T} + \varepsilon [S]^{j+1} \{C\}^{j+1} + (1 - \varepsilon) [S]^j \{C\}^j = \varepsilon \{f\}^{j+1} + (1 - \varepsilon) \{f\}^j$$

Ecuación 26.

Donde $j + 1$ y j indican el nivel de tiempo actual y anterior, ΔT es el paso del tiempo, y donde ε es el coeficiente de ponderación temporal, donde diferentes esquemas de diferencias finitas resultan dependiendo del valor de ε ($\varepsilon = 0$: método explícito, $\varepsilon = 0.5$ método de Crank-Nicholson, $\varepsilon = 1$. método totalmente implícito).

Fuente: adaptado por (Consultoria Ambiental, 2025) del Método de elementos finitos de Galerkin