

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE
EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA**



**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS
EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

**Un modelo de la dispersión de contaminantes basado en reglas de
interacción locales**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

Presenta:

ANGELICA MOTA CORDOVA

Ensenada, Baja California, México, febrero de 2012

TESIS DEFENDIDA POR

Angelica Mota Cordova

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ



Dr. Juan Contreras Pérez

Director del Comité



Dr. Stephen Vaughan Smith

Miembro del Comité



Dr. Pedro Gilberto López Mariscal

Miembro del Comité



Dr. Pratap Narayan Sahay Sahay

Miembro del Comité



Dr. Antonio González Fernández

*Coordinador del programa de
posgrado en Ciencias de la Tierra*



Dr. David Hilario Covarrubias Rosales

Director de Estudios de Posgrado

10 de febrero de 2012

RESUMEN de la tesis de **ANGELICA MOTA CORDOVA**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de **MAESTRO EN CIENCIAS** en **CIENCIAS DE LA TIERRA** con orientación en **GEOCIENCIAS AMBIENTALES**. Ensenada, Baja California, febrero de 2012.

UN MODELO DE LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES BASADO EN REGLAS DE INTERACCIÓN LOCALES

Resumen aprobado por:


Dr. Juan Contreras Pérez
Director de Tesis

El fenómeno de difusión de contaminantes generalmente se modela resolviendo ecuaciones diferenciales definidas en un medio macroscópico continuo. La solución de estas ecuaciones es continua y suave. Estas características no siempre se presentan en la naturaleza. Este trabajo tiene como objetivo presentar un modelo computacional basado en la difusión microscópica de partículas. El fenómeno está gobernado por colisiones entre ellas.

Aquí utilizamos el modelo FHP o modelo de celosías de gas. El modelo de celosías de gas simula en dos dimensiones el movimiento de partículas en una red hexagonal. El modelo evoluciona de acuerdo a reglas locales de interacción entre las partículas. Las reglas locales cumplen las leyes de conservación de energía, densidad y momento. En simulaciones con números grandes de partículas su comportamiento converge a la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Otra ventaja es que el modelo FHP tiene la capacidad de incorporar sólidos y se puede generar un medio poroso de forma natural. Por lo tanto se puede simular los detalles de flujo y transporte en los espacios del medio poroso. Se analizó el comportamiento del modelo de celosías. Se encontró que los sistemas de partículas tienen fuertes efectos dinámicos que no son anticipados por la ecuación de difusión clásica.

El modelo se aplicó a un problema de infiltración de aguas superficiales contaminadas. Los contaminantes utilizados en el modelo se asumen conservativos (sin reacciones). La simulación numérica considera un medio estratificado dividido en dos regiones: una zona superior con estructura vugular y una zona inferior con estructura fracturada. En la zona vugular el flujo se dispersa en forma de avalanchas dando lugar a un sistema críticamente autoorganizado y en la zona fracturada el flujo se canaliza a través de las fracturas. La solución numérica difiere fuertemente de la solución de la ecuación de difusión de Richards la cual es empleada usualmente para simular el flujo en medios porosos.

Palabras Clave: Modelo FHP, efectos dinámicos, zona vugular, zona fracturada.

ABSTRACT of the thesis presented by **ANGELICA MOTA CORDOVA**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of MASTER IN SCIENCES in EARTH SCIENCES with orientation in GEOCIENCIAS AMBIENTALES. Ensenada, Baja California, february2012.

A MODEL OF THE DISPERSION OF POLLUTANTS BASED ON LOCAL INTERACTION RULES

The phenomenon of diffusion of pollutants is generally modeled by solving differential equations defined in continuous macroscopic half. The solution of these equations is continuous and smooth. These features are not always present in nature. This paper aims to present a computational model based on the microscopic diffusion of particles. The phenomenon is governed by collisions.

Here we use the model FHP lattice gas. Lattice model simulates two-dimensional gas motion of particles in a hexagonal lattice. The model evolves according to local rules of interaction between particles. Local rules comply with the laws of conservation of energy, density and momentum. In simulations with large numbers of particles whose behavior converges to the solution of the Navier-Stokes equations.

Another advantage is that the FHP model has the ability to incorporate solid and can produce a naturally porous medium. So you can simulate the details of flow and transport in porous media spaces. The behavior of the lattice model. It was found that particle systems have strong dynamic effects are not anticipated by the classical diffusion equation.

The model was applied to a problem of infiltration of polluted surface waters. The contaminants used in the model are assumed conservative (no reaction). The numerical simulation considered stratified half divided into two regions: an upper zone with vuggy structure and a lower zone with fractured structure. The area is scattered vuggy flow in the form of avalanches resulting in a self-organized critical system in the fractured area and the flow is channeled through the fractures. The numerical solution differs strongly from the solution of the diffusion equation which is employed Richards usually to simulate the flow in porous media.

Keywords: FHP model, dynamic effects, vuggy zone, fractured zone.

*A mis padres Juanita
y Vicente por todo su
apoyo y cariño.*

*A Adrian por estar a mi
lado.*

*A Javier por su amistad
incondicional.*

Agradecimientos

A mi director de tesis, Dr. Juan Contreras Pérez, por el tiempo, dedicación y paciencia que me brindo para el desarrollo de este trabajo.

A todo el departamento de Ciencias de la Tierra, por su ayuda y apoyo. En especial a Martha Elva Barrera, María del Carmen Pérez y José De Jesces Mojarro.

A mis amigos de años Armando, Olaf, Jose, Ahiezer y mis amigos recientes pero igual de importantes Ismael, Roman, Mario, Esther, Nancy, Claudia, Alonso Florian, Néstor y Enrique.

Y a todos mis compañeros del CICESE.

A CICESE por permitirme estudiar la Maestría.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnologia (CONACyT) por otorgarme la beca con número (CVU/Becario): 311709/234924, para realizar mis estudios de Maestria en el programa de Maestria en Ciencias de la Tierra. También agradezco al proyecto externo 644329 y al proyecto CONACyT 60647 por los apoyos logísticos brindados durante el desarrollo de esta tesis.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de Figuras	vii
Lista de Tablas	xvi
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1 El problema de la escala	5
I.2 Teoría microscópica de difusión y transporte	7
I.3 Función de densidad de probabilidad de una partícula	11
II. MODELO DE CELOSÍAS DE GASES	13
II.1 Introducción	13
II.1.1 Modelo de celosías de gases	15
II.2 Modelo FHP o modelo hexagonal	17
II.2.1 Características de las celosías de gases	17
II.2.2 Evolución del modelo	18
II.2.3 Reglas locales de interacción	20
II.3 Condiciones de frontera	29
II.4 Implementación del modelo	30
II.4.1 Implementación del sólido	32
II.5 Densidad	37
III. ANÁLISIS DE CONVERGENCIA DEL MODELO	41
III.1 Introducción	41
III.2 Soluciones analíticas de la ecuación de difusión	42
III.2.1 Solución analítica para dominio infinito	42
III.2.2 Solución analítica para una concentración inicial distribuida en una longitud finita	43
III.2.3 Simulación numérica de la difusión de una concentración inicial en forma de función caja	44

Contenido (continuación)

	Página
III.2.4 Experimento numérico de la dispersión de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida	47
III.3 Solución analítica de una onda difusiva	53
III.3.1 Simulación numérica de la difusión de una concentración inicial en forma de función caja (onda difusiva)	57
III.3.2 Experimento numérico de la dispersión de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida (onda difusiva)	59
III.4 Simulación de la dispersión de partículas a través de un medio poroso	62
IV. ACUÍFERO DE SANTIAGO TIANGUISTENCO COMO ESTUDIO DE CASO	69
IV.1 Modelización del flujo	69
IV.2 Caracterización de la zona de estudio y modelo conceptual	71
IV.3 Resultados de la simulación de Salas-García <i>et al.</i> (2011)	73
IV.4 Aplicación del modelo FHP al acuífero del Valle de Toluca	73
IV.5 Análisis adimensional	83
IV.6 Presión	88
V. CONCLUSIONES	97
REFERENCIAS	99
A. PROPIEDADES MATERIALES MACROSCÓPICAS DEL MODELO FHP	101

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Modelo de la difusión de un soluto utilizando el operador laplaciano. La solución se obtuvo por diferencias finitas centrales con una concentración inicial de 100 mg/cm^3 en el extremo superior. Obsérvese que el modelo predice una distribución suave.	5
2	a) Agregación por difusión limitada da lugar a la formación de estructuras dendríticas por precipitación química gobernada por diferencias de potencial químico. b) Percolación de un fluido a través de un medio poroso. Nótese como esas estructuras carecen de suavidad.	6
3	Evolución de la densidad de probabilidad de una partícula que describe una caminata aleatoria. La partícula inicialmente se encuentra en el origen. Dado que su posición es conocida su probabilidad es uno en ese punto. En el siguiente paso en el tiempo ($t = 2$) la partícula puede desplazarse hacia la derecha o la izquierda. Por lo tanto, la probabilidad de que la partícula se encuentre en -1 o 1 es $\frac{1}{2}$. Con argumentos similares se puede encontrar la probabilidad para pasos sucesivos en el tiempo. .	12
4	Modelo de agregación por difusión limitada. El modelo inicialmente tiene una semilla de nucleación en su centro. Partículas coloidales que describen una caminata aleatoria colisionan contra ella y se adhieren irreversiblemente formando un patron dendrítico fractal.	14
5	El modelo de doble capa eléctrica de una partícula esférica esta formado por dos regiones. 1. La región más próxima a la superficie de la partícula esta formada por iones adheridos alrededor para neutralizar su carga. 2. La segunda capa es más extensa y debido a la agitación térmica del líquido que lo contiene causa un movimiento iónico y forma una capa difusa alrededor de la partícula.	16
6	Red triangular equilátera que forma regiones hexagonal.	17
7	Direcciones del vector velocidad dirigidas a lo largo de los enlaces de la red.	18

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
8	Estado uno: propagación de las partículas.	19
9	Estado dos: colisión y dispersión de las partículas.	19
10	Pre y post colisión en el espacio del campo de desplazamiento.	21
11	Pre y post colisión en el espacio del campo de velocidad. . . .	21
12	Las variables A-F describen las direcciones en las que una partícula de la celosía triangular mostrada en la Figura 6 se puede propagar.	22
13	Valores decimales correspondientes a las variables $A-F$ y adicionalmente el valor decimal de S y R	22
14	Configuración pre y post colisión de una partícula.	23
15	Configuración pre y post colisión de dos partículas.	24
16	Configuración pre y post colisión de tres partículas.	24
17	Configuración pre y post colisión de cuatro partículas.	25
18	Configuración pre y post colisión de cinco y seis partículas. . .	25
26		
20	Combinaciones posibles de post-colisiones. El recuadro de la esquina inferior derecha muestra el número en decimal de post-colisión. Los casos donde no cambia su estado de pre y post colisión solo se muestra un número. Los estados que cambian se presentan dos números el superior es el número de pre-colisión y el inferior corresponde al número de post-colisión.	27
21	Regla local de interacción en la presencia de sólido. La partícula que colisiona con un sólido en A rebota y ahora va en dirección hacia D	28
22	Regla local de interacción para decidir entre los estados alternativos de post-colisión.	28

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
23	Condiciones de frontera del modelo FHP. <i>a)</i> En la topología cilíndrica las fronteras son periódicas en una sola dirección. <i>b)</i> En la topología toroidal las fronteras son periódicas en ambas direcciones.	29
24	Codificación de función en lenguaje C.	30
25	Algoritmo general. Las instrucciones que se encuentran entre las flechas se repiten de acuerdo al número de pasos en el tiempo establecido.	31
26	Visualización de la interacción de 100 partículas con OpenDX. Las partículas están representadas por las esferas verdes y las flechas corresponden al vector de velocidad. <i>a)</i> Propagación: inicialmente las partículas están dispuestas en la red hexagonal. A cada partícula se le asignó una velocidad de propagación aleatoria. <i>b)</i> Colisión: ahora las partículas se encuentran en la posición de acuerdo al vector de velocidad inicial; algunas partículas colisionan. <i>c)</i> Reglas locales de interacción: las partículas que colisionan se les aplica las reglas locales de interacción descritas en las Figuras 19 y 20. <i>d)</i> Dispersión: las partículas ahora se dispersan de acuerdo a los vectores de velocidad calculados con las reglas locales de interacción.	33
27	Dibujo representando las dos fases del medio poroso, la matriz sólida y los poros.	34
28	Implementación del sólido al algoritmo principal	34
29	Medio poroso con estructura aleatoria generado con el algoritmo descrito en la sección II.4.1.	35

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
30	Simulación del flujo en un medio poroso. Las partículas están representadas por las esferas verdes, las flechas corresponden al vector de velocidad y los rombos rojos representan al sólido (el sólido esta colocado aleatoriamente). <i>a)</i> Propagación: inicialmente las partículas están dispuestas de aleatoriamente en los nodos de la red hexagonal. A cada partícula se le asignó una velocidad de propagación aleatoria. <i>b)</i> Colisión: ahora las partículas se encuentran en la posición de acuerdo al vector de velocidad inicial; algunas partículas colisionan entre ellas y otras colisionan con el sólido. <i>c)</i> Reglas locales de interacción: las partículas que colisionan entre ellas se les aplica las reglas locales de interacción descritas en las Figuras 19 y 20. Las partículas que colisionan con el sólido se les aplica las reglas locales de interacción descritas en la Figura 21. <i>d)</i> Dispersión: las partículas ahora se dispersan de acuerdo a los vectores de velocidad calculados con las reglas locales de interacción.	36
31	Simulaciones con 5 y 10 pasos en el tiempo. En rojo la posición de las partículas inicialmente y en negro la posición de las partículas propagadas.	37
32	Corte de la distribución de densidad para el modelo de la Figura 31. Nótese que la densidad muestra fuertes variaciones debido a que el calculo esta en la escala de partícula.	38
33	Área de promediado sobrepuesta a la malla hexagonal.	39
34	Distribución de densidad calculada con la nueva malla mostrada en la Figura 33. Ahora la distribución es suave y sin altas frecuencias.	40
35	Solución analítica para condiciones de frontera infinitas y concentración inicial C_0 instantánea. En color rojo la concentración instantánea inicial C_0 y en negro las curvas calculadas con la solución analítica mostrada en la ecuación 34.	43
36	Condiciones iniciales para la solución analítica para una concentración inicial distribuida en una longitud finita.	44

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
37	Solución analítica para condiciones de frontera finitas y concentración inicial en forma de función caja. En color rojo la concentración inicial y en negro las curvas calculadas con la solución analítica.	45
38	Experimento numérico de la dispersión de 2850 partículas dispuestas inicialmente en una área rectangular en el centro de la región simulada. Las fronteras son periódicas con topología toroidal.	46
39	Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 38 y la ecuación 35. La solución numérica esta en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica.	48
40	Residuales de la Figura 39. Nótese que los residuales aumentan hasta llegar al 100% indicando que no hay convergencia.	49
41	Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas en el centro y alrededor 5158 partículas diseminadas, las fronteras son periódicas con topología toroidal.	50
42	Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 41 y la ecuación 35. La solución numérica esta en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica.	52
43	Residuales de la Figura 42. Nótese que los residuales aumentan hasta llegar al 100% indicando que no hay convergencia.	53
44	a) La primera ley de Fick estable que aparece un flujo instantáneo sobre la distancia l cuando se introduce un cambio en la concentración. El flujo esta dado por $q = D(C_1 - C_0)/l$. b) La ecuación del telegrafista (37) establece que el flujo se establece en el tiempo característico $\frac{1}{\tau^2}$	54
45	En la gráfica superior se muestra el la propagación de dos ondas (función $C_1(x, t)$ y $C_2(x, t)$ en ecuaciones 41 y 42), una hacia la derecha y otra hacia la izquierda. Cada onda, además, sufre disipación por difusión. En la gráfica inferior se muestra el proceso resultante que emerge de la suma de las ondas C_1 y C_2	56

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
46	Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 38 y la ecuación 43. La solución numérica esta en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica. En los 70 pasos en el tiempo la solución numérica tiende a la solución analítica.	58
47	Residuales de la Figura 46.	59
48	Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 41 y la ecuación 43. La solución numérica esta en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica. La solución numérica tiende a la solución analítica en los 70 pasos en el tiempo.	61
49	Residuales de la Figura 48.	62
50	Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 5% de sólido colocado aleatoriamente alrededor de la concentración central.	63
51	Evolución de la simulación numérica con 5% de sólido. Nótese que en los primeros pasos donima difusión, en los pasos intermedios hay propagación de ondas y al final difusión entre los poros.	64
52	Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 20% de sólido diseminado alrededor de la concentración central.	65
53	Evolución de la simulación numérica con 20% de sólido. El comportamiento en los primeros pasos es de difusión, en los pasos intermedios hay propagación de ondas y al final difusión entre los poros. Nótese como la distribución de densidad no tiene un estado estacionario y que esta oscilando como un cuerda sujeta en sus extremos.	66
54	Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 40% de sólido colocado aleatoriamente alrededor de la concentración central.	67

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
55	Evolución de la simulación numérica con 40% de sólido. El comportamiento en todos pasos es dimánico con difusión lenta entre los poros.	68
56	Columna estratigráfica cortada por un pozo de monitoreo perforado en el Valle de Toluca. Tomado de Salas-García <i>et al.</i> (2011).	71
57	Modelo conceptual de la zona de estudio. Las propiedades materiales de las diferentes capas del modelo se muestran en la Tabla VI.	72
58	Simulación de transporte y su perfil estratigráfico asociado, donde se indica cómo el contaminante alcanza el nivel freático en tres años.	74
59	a) Representación del modelo conceptual de la zona de estudio con los valores de porosidad eficaz mostrados en la Tabla VI. b) Densidad de sólido, la mayor concentración de sólido se encuentra en la región que simula el basalto fracturado y en otras capas se forman vugulos que a la vez generan obstáculos para el paso de partículas.	75
60	Evolución de la simulación numérica hasta el paso 3500 en el tiempo. En el paso 500 en el tiempo las partículas han atravesado la mitad. de la primera capa. En el paso 1500 el frente de partículas atravesó por completo la primera capa. En los pasos 2500 y 3500 el frente de partículas es más lento por la disminución de la porosidad efectiva de la segunda capa.	77
61	Gráficas de densidad hasta el paso 3500 en el tiempo. Del paso 500 al 2500 la pendiente es suave y en el paso 35000 la pendiente tiene un salto abrupto.	78

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
62	Evolución de la simulación numérica cada 30000 pasos hasta el paso 120000. En el paso 30000 el frente de partículas atravesó la mitad de la segunda capa. A partir del paso 60000 en el tiempo algunas partículas empiezan a canalizarse a través de las fracturas. En el paso 90000 el frente de partículas atravesó por completo la segunda capa. En el paso 120000 en el tiempo el frente de partículas llegó a la cuarta capa.	79
63	Gráficas de densidad hasta el paso 120000 en el tiempo. La pendiente para todos los pasos no es suave y tiene saltos abruptos debidos a la influencia de los vugulos formados por el sólido que retiene las partículas y los cambios de porosidad de cada capa.	80
64	Evolución de la simulación numérica cada 100000 pasos en el tiempo. Las primeras dos capas se encuentran totalmente saturadas de partículas y estas se canalizan en las fracturas atravesando casi por completo la cuarta capa donde se encuentra el nivel freático (Figura 58).	81
65	Gráficas de densidad hasta el paso 500000 en el tiempo. Las dos primeras capas se encuentran la saturadas de partículas. En zona de fracturas disminuye la densidad de partículas. En la cuarta capa hay un aumento progresivo de densidad de partículas conforme aumenta la canalización de partículas en las fracturas.	82
66	Gráficas de concentración para las primeras tres capas del modelo, el valor que se muestra es el tiempo adimensional que tarda el contaminante en atravesar cada capa. Las gráficas <i>a)</i> y <i>c)</i> corresponden al modelo UNSAT y las gráficas <i>b)</i> y <i>d)</i> corresponden al modelo FHP.	89
67	Gráficas de concentración para las últimas dos capas del modelo, el valor que se muestra es el tiempo adimensional que tarda el contaminante en atravesar cada capa. Las gráficas <i>a)</i> y <i>c)</i> corresponden al modelo UNSAT y las gráficas <i>b)</i> y <i>d)</i> corresponden al modelo FHP.	90

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
68	Las imágenes <i>a</i>), <i>c</i>) y <i>e</i>) corresponden a la densidad de partículas en la región de transición entre la primera y segunda capa. Las imágenes <i>b</i>), <i>d</i>) y <i>f</i>) muestran la presión adimensional en la región de transición entre la primera y segunda capa.	93
69	Pila de arena formada añadiendo lentamente los granos de arena, uno tras otro. La auto-organización crítica emerge de la interacción entre la adición de energía potencial a la pila de arena y su disipación vía interacciones entre granos.	94
70	El sistemas críticamente auto-organizados resulta de la interferencia de la estructura de la matriz sólida con el flujo de partículas . <i>a</i>) Las partículas avanzan rápidamente a lo largo de los poros. <i>b</i>) Los poros se comienzan a saturar y las partículas comienzan a interactuar entre sí. <i>c</i>) El poro se encuentra saturado y las partículas avanzan en forma de avalanchas.	96

Lista de Tablas

Tabla	Página
I Conservación de momento y energía.	20
II Valores utilizados en la solución analítica dada por la ecuación 35, cuando la concentración inicial tiene forma de función caja	47
III Valores utilizados en la ecuación 35 para el caso de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida.	51
IV Valores de los parámetros libres de la solución de la ecuación del telegrafista 43. Nótese que el valor del coeficiente de difusión disminuyen a partir del paso 40 en el tiempo y el valor de velocidad de propagación de onda aumenta.	57
V Valores de los parámetros libres utilizados en la solución de la ecuación del telegrafista 43. Nótese que el valor del coeficiente de difusión disminuye a partir del paso 40 en el tiempo y el valor de velocidad de propagación de onda aumenta.	60
VI Valores de la porosidad eficaz y la conductividad hidráulica para las diferentes capas de la zona vadosa del acuífero del Valle de Toluca. Tomados de Salas-García <i>et al.</i> (2011).	72
VII Valores de densidad (d), viscosidad (μ), constante de Koseny (c) y de permeabilidad (k). Estos valores fueron obtenidos en el paso 500000, cuando se encuentra saturado.	87
VIII Valores característicos del modelo continuo y del modelo FHP. ul corresponde a unidades de longitud del modelo FHP o longitud modelada y ut corresponde a unidades de tiempo del modelo FHP o tiempo modelado.	87
IX Valores característicos del modelo continuo y del modelo FHP.	88
X Propiedades macroscópicas del modelo FHP. Tomados de Frisch <i>et al.</i> (1987).	101

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Los contaminantes en el subsuelo se dispersan por medio de cuatro mecanismos: difusión, transporte advectivo, reacción y adsorción (Fetter, 1999). La difusión es un proceso irreversible que consiste en el movimiento aleatorio de partículas debido a su energía térmica. El transporte advectivo consiste en el arrastre de la concentración por movimiento del medio en el que está disuelto. La reacción se refiere a la interacción del contaminante con el medio que lo contiene produciendo nuevas especies químicas. Adsorción es la incorporación del contaminante en la matriz porosa por efectos electrostáticos y de equilibrio químico. Todos estos procesos ocurren a escala del coloide ($1\mu\text{m}$ a $10\eta\text{m}$). El fenómeno de dispersión se modela generalmente con ecuaciones diferenciales promediadas macroscópicas definidas en un medio continuo. Un continuo es un modelo matemático de la estructura de la materia el cual consiste de un medio ideal homogéneo que puede subdividirse en volúmenes infinitesimales sin que estos pierdan las propiedades a escalas macroscópicas.

Si hacemos un balance de masa a nivel macroscópico, estos procesos los podemos expresar como

$$\frac{\partial C}{\partial t} = Q^d + Q^t + Q^a + Q^r, \quad (1)$$

en donde C es la concentración del contaminante [M L^{-3}], Q^d es el cambio de concentración por difusión, Q^t es el cambio de concentración por transporte, Q^a es el cambio de

concentración por adsorción y Q^r es el cambio de concentración por reacción. Veamos con más detalle cada uno de los procesos.

1. Difusión

La masa difundida en un medio se puede expresar por medio del flujo de la masa q el cual, es proporcional al gradiente de la concentración ∇C . Es decir, la concentración inicial se moverá de un área de mayor concentración a un área de menor concentración en la dirección gradiente. Esto se conoce como la primera ley de Fick (Bird *et al.*, 2001) y es expresada como:

$$q = -D\nabla C, \quad (2)$$

en donde q tiene unidades de masa de soluto unidad de área por tiempo, D es el coeficiente de difusión el cual controla la movilidad del soluto [$L^2 T^{-1}$] y C es la concentración [$M L^{-3}$]. La relación entre el flujo de masa por difusión q y el cambio de concentración por este mecanismo está dado por la ecuación diferencial:

$$Q^d = -\nabla \cdot (-D\nabla C), \quad (3)$$

donde $\nabla \cdot$ es el operador divergencia. Considerando a D constante, entonces la ecuación (3) se reduce a:

$$Q^d = D\nabla^2 C, \quad (4)$$

donde ∇^2 es el operador laplaciano.

2. Transporte advectivo

La concentración de una sustancia al disolverse en un medio fluido puede ser arrastrada debido al movimiento del fluido. A este fenómeno se le conoce como transporte advectivo. El movimiento advectivo es descrito matemáticamente por la velocidad del fluido multiplicando al gradiente de concentraciones (Potter y Wiggert, 2002)

$$Q^T = \mathbf{v} \cdot \nabla C, \quad (5)$$

donde \mathbf{v} es el promedio de la velocidad del fluido [$L T^{-1}$]

3. Reacción y adsorción

La concentración de un soluto está sujeta a diferentes procesos químicos que pueden introducir cambios temporales. Entre ellos se encuentran procesos como el equilibrio químico local, si hay reacciones homogéneas y heterogéneas, interacciones con superficies polares (adsorción) y, por supuesto, las reacciones de la química clásica (la precipitación, disolución, oxidación, reducción, etc.). Estos fenómenos son sumamente complejos porque dependen de la temperatura, presión, estructura molecular, catalizadores y otros potenciales químicos (Miller y Weber, 1984) (Rubin, 1983). Un modelo sencillo que captura estos procesos es el siguiente:

$$\frac{B_d}{\theta} \frac{\partial C^*}{\partial t} + \frac{\partial [C]}{\partial t}, \quad (6)$$

donde C^* es la cantidad de soluto adsorbido por unidad de peso del sólido, B_d es la densidad aparente del fluido y θ es el contenido de humedad volumétrica o porosidad media saturada.

El segundo término de la ecuación (6) representa fuentes o pérdidas del soluto por reacciones químicas con otras especies químicas presentes en el fluido y la matriz porosa, i.e.,



en esta ecuación M_i son las especies químicas reactivas y A_i son las nuevas especies químicas y m, n son las constantes estequiométricas de la reacción. La tasa de reacción está dada por

$$\frac{\partial[C]}{\partial t} = k(T)[C]^m[M]^n. \quad (8)$$

En la relación 8, $k(T)$ es la velocidad de la reacción dada por la ecuación de Arrhenius

$$k(T) = A_0 e^{\frac{-E_a}{RT}}. \quad (9)$$

La cantidad $m + n$ es el orden de la reacción, A_0 es el factor pre-exponencial, E_a es la energía de activación, T es la temperatura y R es la constante universal de los gases.

Finalmente sustituyendo las expresiones (4), (5) y (6) en la ecuación de cambio de concentración (1) se obtiene la siguiente ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C - \mathbf{v} \cdot \nabla C - \frac{B_d}{\theta} \frac{\partial C^*}{\partial t} + \frac{\partial[C]}{\partial t}. \quad (10)$$

La ecuación anterior captura de manera simplificada los procesos de difusión, transporte, adsorción y reacción sus limitaciones son discutidas a continuación.

I.1 El problema de la escala

Uno de los problemas de las ecuaciones (10), (4), (5) y (6) es que están construidas utilizando un modelo continuo de la materia. Esto es una necesidad matemática, ya que la herramienta que se emplea para describir los cambios de estado continuo es la geometría diferencial. Esto impone restricciones muy severas en las funciones utilizadas para representar las cantidades de interés. Básicamente se requiere que sean continuas y suaves. Es decir, no deben de existir saltos ni singularidades en regiones infinitesimalmente pequeñas. Por ejemplo, el operador laplaciano ∇^2 del primer término del lado derecho de la ecuación (10) restringe que la función sea de clase \mathcal{C}^2 . Este tipo de funciones son continuas con primera derivada continua (Figura 1).

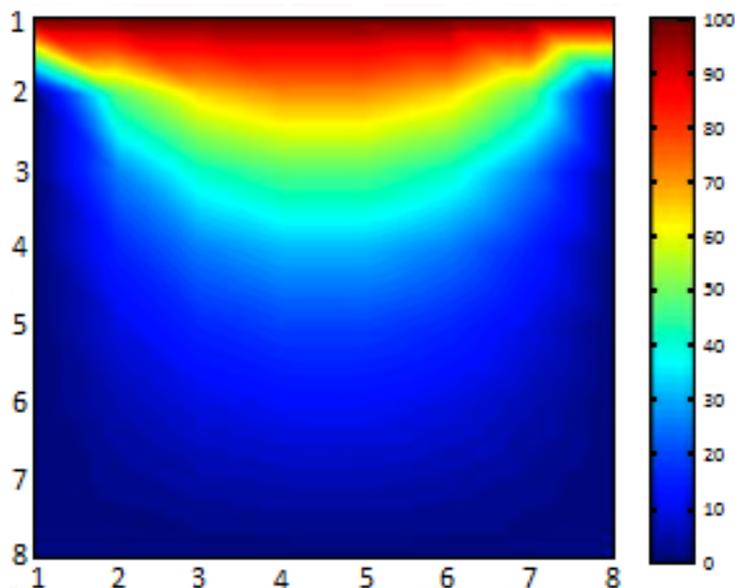


Figura 1. **Modelo de la difusión de un soluto utilizando el operador laplaciano. La solución se obtuvo por diferencias finitas centrales con una concentración inicial de 100 mg/cm^3 en el extremo superior. Obsérvese que el modelo predice una distribución suave.**

En otras palabras el utilizar ecuaciones diferenciales elimina la posibilidad de que C sea una función rugosa. Esto, a su vez, impiden capturar procesos importantes como la agregación por difusión limitada (Figura 2) y fenómenos de canalización y localización como percolación.

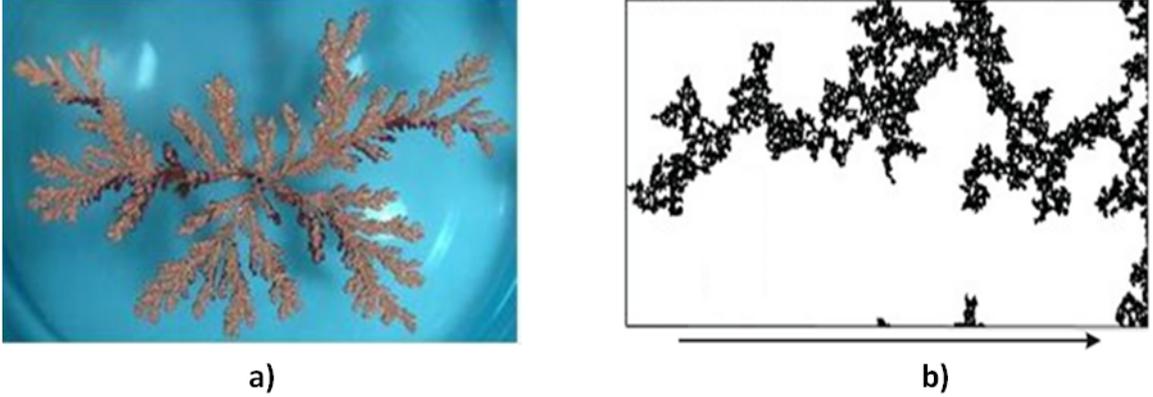


Figura 2. *a)* **Agregación por difusión limitada da lugar a la formación de estructuras dendríticas por precipitación química gobernada por diferencias de potencial químico.** *b)* **Percolación de un fluido a través de un medio poroso. Nótese como esas estructuras carecen de suavidad.**

Analicemos brevemente como es que el operador $\nabla^2 C$ produce necesariamente soluciones suaves. Para esto el operador se puede aproximar por medio de diferencias finitas en una dimensión de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} \left[C(x + \Delta x, t) - 2C(x, t) + C(x - \Delta x, t) \right]. \quad (11)$$

Esto también se puede expresar como

$$\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} \left[\frac{C(x + \Delta x, t) + C(x - \Delta x, t)}{2} - C(x, t) \right]. \quad (12)$$

Aquí podemos hacer la siguiente interpretación de la ecuación (12). La diferencia en el término de la derecha de la ecuación (12) es el promedio de la concentración en $C(x, t)$ en el intervalo $2\Delta x$. (Farlow, 1993)

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \left[C(x + \Delta x, t) + C(x - \Delta x, t) \right], \quad (13)$$

por lo que

$$\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{2}{\Delta x^2} [\bar{C} - C(x, t)]. \quad (14)$$

De aquí podemos concluir que la ecuación (10) involucra el cálculo recursivo de promedios para obtener los cambios de concentración en el tiempo. Por lo tanto, las concentraciones se vuelven cada vez más suaves conforme el tiempo se incrementa.

I.2 Teoría microscópica de difusión y transporte

En la escala microscópica los solutos consisten de un conjunto de partículas (coloides) suspendidas en un medio huésped denominado solvente. El botánico Robert Brown formó un coloide formado por granos de polen disueltos en agua y observó que dichas partículas tienen movimiento irregular complejo (Dhont, 2003). En 1905 Albert Einstein publicó su trabajo titulado: “On the movement of small particles suspended in a stationary liquid demanded by the molecular kinetic theory of heat”. En él explicó por primera vez la mecánica del movimiento browniano (Braun, 2003), en donde, de acuerdo a la teoría cinemática molecular, las partículas suspendidas en un líquido describen movimientos aleatorios. A escala macroscópica esto se manifiesta como el fenómeno de difusión.

Examinemos ahora en detalle el movimiento originado por el movimiento térmico molecular (Berg, 1993). Por simplicidad nos enfocaremos al análisis de dichos movimientos en una dimensión y supondremos que su movimiento es descrito por las siguientes reglas:

1. Las partículas inician en el tiempo $t = 0$ en la posición $x = x_0$.
2. Cada paso de la partícula hacia la derecha o hacia la izquierda una vez cada τ segundos, se mueve a velocidad $\pm v_x$ una distancia $\delta = \pm v_x \tau$. τ y δ son constantes.
3. La probabilidad de ir a la derecha en cada paso es $\frac{1}{2}$, y la probabilidad de ir a la izquierda en cada paso es $\frac{1}{2}$. Es decir, los pasos son estadísticamente independientes.
4. Las partículas no interactúan entre si. En la práctica, esto será cierto siempre que la suspensión de partículas están razonablemente diluida.

De este modelo se tiene que la posición de la i -ésima partícula después del paso n -ésimo es:

$$x_i(n) = x_i(n-1) \pm \delta \quad (15)$$

Dado que las partículas describen una caminata aleatoria, en general no es posible determinar su posición en términos de funciones elementales conocidas. Sin embargo, si nos es posible derivar expresiones que determinen, por ejemplo, cual es su posición promedio. La posición promedio de las partículas en el n -ésimo paso esta dado por:

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(n). \quad (16)$$

Expresando $x_i(n)$ en términos de $x_i(n-1)$:

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i(n-1) \pm \delta]. \quad (17)$$

Como la partícula tiene la misma probabilidad de avanzar en dirección positiva $+\delta$ o negativa $-\delta$, el término $\pm\delta$ se cancela al efectuar el promedio:

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i(n-1)], \quad (18)$$

$$\langle x(n) \rangle = \langle x(n-1) \rangle. \quad (19)$$

De aquí podemos concluir que la difusión por movimiento Browniano es extremadamente ineficiente puesto que en promedio la partícula se va a encontrar en la misma posición inicial después de n pasos. Sin embargo, esto no significa que la partícula no se desplaza. Una medida conveniente para estimar la distancia efectiva recorrida es la media cuadrática del desplazamiento $\langle x^2(n) \rangle^{\frac{1}{2}}$. Para encontrar $\langle x^2(n) \rangle$ elevamos la ecuación (17) al cuadrado

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2(n-1) \pm \delta x_i(n-1) + \delta^2 \quad (20)$$

Utilizando el argumento anterior el término $\pm\delta x_i(n-1)$ debe cancelarse por su naturaleza aleatoria

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2(n-1) + \delta^2 \quad (21)$$

Consideremos que $x(0) = 0$, por lo tanto $x^2(0) = 0$. Sin tomamos el primer paso en el tiempo entonces encontramos que

$$x^2(1) = \delta^2 \quad (22)$$

Es decir, la distancia recorrida por la partícula no es nula. Es obvio que después de n pasos

$$x^2(n) = n\delta^2 \quad (23)$$

De aquí podemos concluir que el promedio de los cuadrados del desplazamiento aumenta proporcionalmente con el número de pasos. Ahora bien, de acuerdo a la regla 1, la partícula ejecuta n pasos en un tiempo $t = n\tau$. Utilizando esta relación obtenemos:

$$\langle x^2(t) \rangle = \left(\frac{t}{\tau}\right)\delta^2 = \left(\frac{\delta^2}{\tau}\right)\frac{2}{2}t. \quad (24)$$

Ahora por conveniencia, definimos un coeficiente que se conoce como el coeficiente de difusión D con unidades $[L^2T^{-1}]$:

$$D = \frac{\delta^2}{2\tau} \quad (25)$$

$$\langle x^2(n) \rangle = 2Dt \quad (26)$$

$$\langle x^2(n) \rangle^{\frac{1}{2}} = (2Dt)^{\frac{1}{2}} \quad (27)$$

por lo tanto la distancia efectiva recorrida por la partícula se incrementa como \sqrt{t} . En general, el coeficiente de difusión depende del tamaño de la partícula Φ , de la viscosidad del medio μ , de la temperatura absoluta T y de la constante de Boltzmann κ .

$$D = f\left(\frac{T\kappa}{\mu\Phi}\right) \quad (28)$$

I.3 Función de densidad de probabilidad de una partícula

Ahora abordaremos el problema de establecer la distribución de probabilidad de encontrar la partícula en una posición dada. Para encontrar la partícula, denominemos a la probabilidad de que la partícula camine hacia la izquierda como q y la probabilidad de que se desplace a la derecha como p . Así la probabilidad de que la partícula se encuentre k veces a la derecha después de n pasos esta dada por la distribución binomial (Figura3):

$$P(k; n, p) = \frac{n!}{k!(n-k)!} p^k q^{n-k}. \quad (29)$$

Sin embargo, una molécula pequeña que está sometida a difusión, dará millones de pasos en un microsegundo y la distribución binomial converge a una distribución Gaussiana o normal:

$$P(x)dx = \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx \quad (30)$$

Donde $P(x)dx$ es la probabilidad de encontrar una partícula entre x y $x + dx$

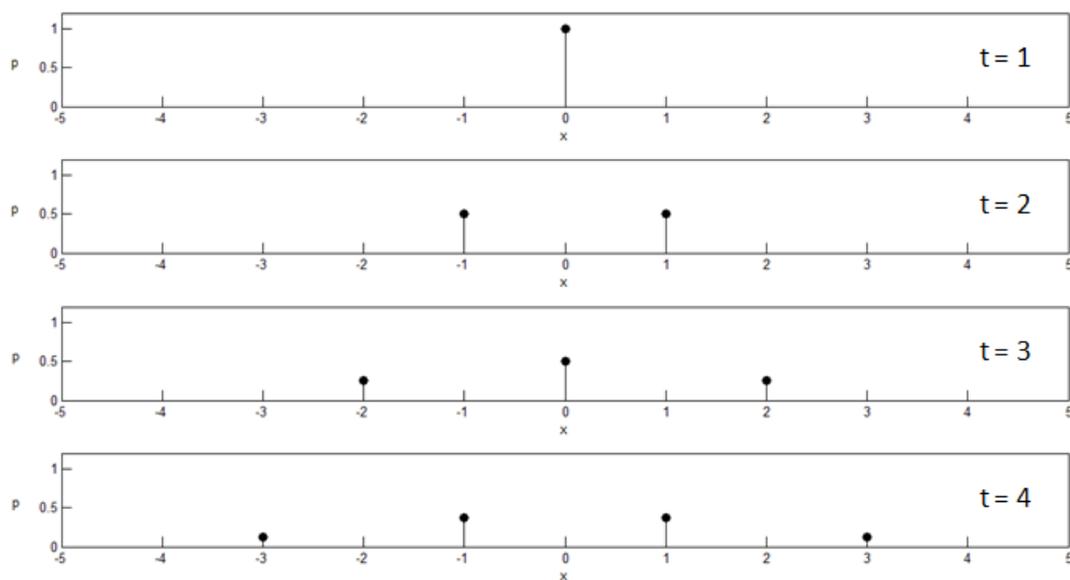


Figura 3. Evolución de la densidad de probabilidad de una partícula que describe una caminata aleatoria. La partícula inicialmente se encuentra en el origen. Dado que su posición es conocida su probabilidad es uno en ese punto. En el siguiente paso en el tiempo ($t = 2$) la partícula puede desplazarse hacia la derecha o la izquierda. Por lo tanto, la probabilidad de que la partícula se encuentre en -1 o 1 es $\frac{1}{2}$. Con argumentos similares se puede encontrar la probabilidad para pasos sucesivos en el tiempo.

Capítulo II

MODELO DE CELOSÍAS DE GASES

II.1 Introducción

En el capítulo anterior se discutió algunas de las limitaciones de las ecuaciones diferenciales macroscópicas utilizadas para modelar procesos de dispersión de contaminantes y se mostró como estas producen necesariamente soluciones suaves. Sin duda, muchas situaciones de interés práctico son descritas correctamente por esas soluciones. Sin embargo, hay procesos difusivos, i.e., que están gobernados por movimientos aleatorios en la escala microscópica, que no son descritos por ellas. Un ejemplo de esto es la formación de agregados cristalinos por difusión limitada como lo muestra la Figura 2. El proceso se caracteriza por la precipitación de un soluto en concentraciones muy bajas alrededor de un punto de nucleación. Esto resulta en la formación de un agregado cristalino con una estructura dendrítica fractal.

Un modelo basado en reglas de interacción local que captura fielmente el proceso es el siguiente (Witten y Sander, 1981). Consideremos partículas coloidales que describen un movimiento Browniano en un fluido y que estas se adhieren irreversiblemente unas tras otras al ponerse en contacto entre sí. Supongamos que la densidad de las partículas coloidales es baja. Así se podrá imaginar que el proceso de agregación se produce una partícula a la vez.

En el centro hay una partícula-semilla en el origen de un sistema arbitrario de coordenadas. Ahora introduzcamos otra partícula a una cierta distancia de la semilla y se

deja que realice una caminata aleatoria. Esa partícula puede escapar al infinito o ponerse en contacto con la semilla. Si lo hace, se adhiere irreversiblemente. Al introducir una tercera partícula en el sistema y permitir una caminata aleatoria puede ocurrir que se adhiera al racimo de dos partículas o se escape al infinito. Este proceso se puede repetir n veces de acuerdo con el número de partículas y los recursos computacionales disponibles. La Figura 4 muestra una gráfica resultado de aplicar el modelo anterior. Como puede apreciarse la similitud entre la estructura resultante con estructuras naturales es sorprendente, dada la simplicidad del modelo. Aquí hay que observar que el modelo anterior es discreto y difusivo. Sin embargo, la estructura resultante no es suave ni continua.

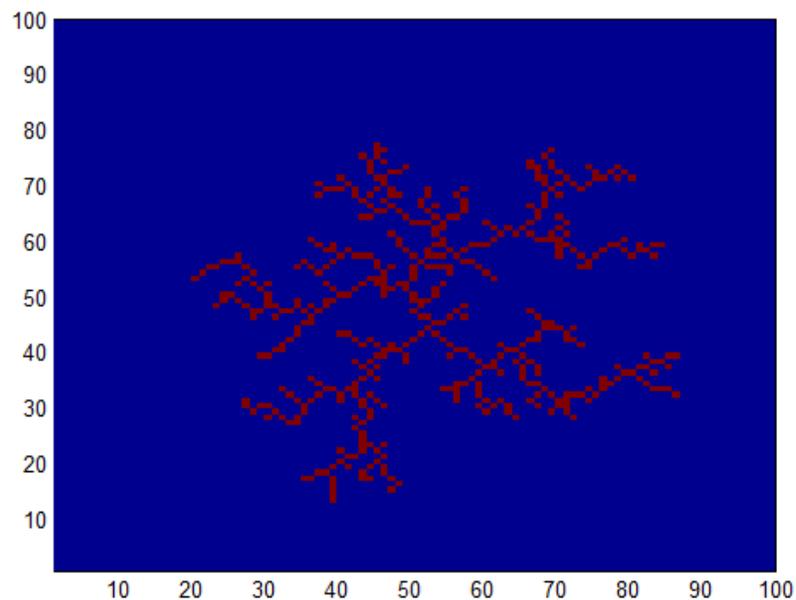


Figura 4. Modelo de agregación por difusión limitada. El modelo inicialmente tiene una semilla de nucleación en su centro. Partículas coloidales que describen una caminata aleatoria colisionan contra ella y se adhieren irreversiblemente formando un patron dendrítico fractal.

El modelo anterior de agregación por difusión limitada (ADL) es un ejemplo de autómata celular. Un autómata celular es un modelo del comportamiento de un conjunto de interactores con estados finitos simples que se autorganizan en pasos discretos en el tiempo. Por ejemplo, para el caso del modelo ADL las partículas del soluto tienen dos estados: un estado que es fijo y otro estado en movimiento Browniano. En los autómatas celulares la evolución del sistema esta controlado por una serie de reglas locales que caracterizan la interacción entre los actores en una vecindad pequeña a su alrededor. El patron que emerge en la Figura 4 esta controlado por la siguiente regla: si dos partículas entran en contacto, estas se adhieren unas con otras. Adicionalmente, un autómata celular debe tener una topología simple que gobierna la geometría de las vecindades y las reglas de interacción de los actores.

II.1.1 Modelo de celosías de gases

En la sección anterior se describió un ejemplo de autómata celular. El modelo toma en cuenta bajas concentraciones de soluto que permite simular el proceso de agregación por difusión limitada. Este modelo es válido para coloides inestables que presentan agregación debido a las fuerzas electrostáticas de van der Waals (Dhont, 2003).

Ahora se presenta un modelo general para simular la dispersión de coloides utilizando modelos de colisiones de gases. Las celosías de gases es uno de los modelos más elementales para simular un fluido en dos dimensiones. Para comenzar, el modelo contempla una alta concentración de soluto y la interacción de todas las partículas entre sí. El modelo, además, es valido para coloides estables. En estos las interacciones o colisiones entre partículas coloidales son reversibles. Los coloides estables evitan agregarse debido al enmascaramiento de su carga electrostática superficial por la presencia

de una doble capa eléctrica lo que estabiliza al sistema coloidal (Figura 5).

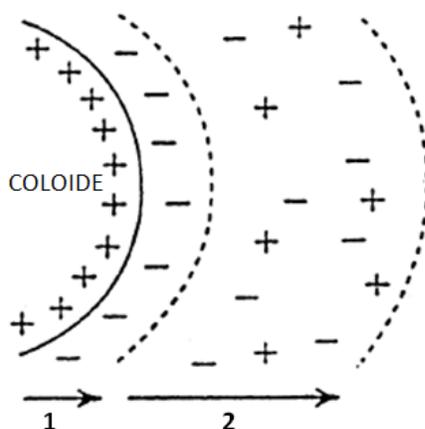


Figura 5. El modelo de doble capa eléctrica de una partícula esférica está formado por dos regiones. 1. La región más próxima a la superficie de la partícula está formada por iones adheridos alrededor para neutralizar su carga. 2. La segunda capa es más extensa y debido a la agitación térmica del líquido que lo contiene causa un movimiento iónico y forma una capa difusa alrededor de la partícula.

El modelo de celosías de gases es similar al modelo de autómatas celulares ya que ambos tienen una topología simple que gobierna la geometría de las vecindades y la evolución del sistema está controlado por una serie de reglas locales (Wolfram, 2002). Su evolución temporal es en pasos discretos y en cada paso de tiempo la actualización se divide en dos estados: uno de propagación y otro de colisión (Wolf-Gladrow, 2000). En el estado de propagación cada partícula se mueve en una dirección definida y a una cierta velocidad. Como todas las partículas se están moviendo algunas pueden colisionar entre sí. En este estado se utilizan una serie de reglas locales de interacción que determinan como ocurre la dispersión posterior a la colisión.

II.2 Modelo FHP o modelo hexagonal

En 1986, Frisch, Hasslacher y Pomeau desarrollaron el modelo llamado FHP, por las siglas de los nombres los científicos que desarrollaron el modelo. Este es un modelo de celosías de gas en dos dimensiones que simula el movimiento de partículas discretas en una red hexagonal. En simulaciones con números grandes de partículas su comportamiento converge a la solución de las ecuaciones del movimiento de fluidos de Navier-Stokes (Frisch *et al.*, 1986).

II.2.1 Características de las celosías de gases

Para que el espacio celular converja a las ecuaciones de Navier-Stokes es necesario lo siguiente:

1. Una red en la que las partículas residen sólo en los vértices. La red es regular triangular equilátera que forma regiones hexagonal que garantizan isotropía (Figura 6).

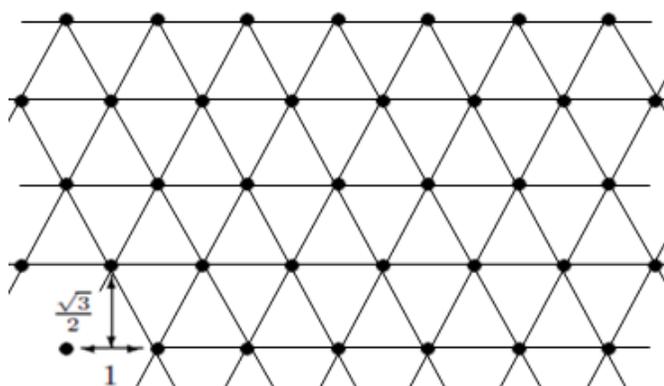


Figura 6. Red triangular equilátera que forma regiones hexagonal.

2. Una población de partículas, cada una con masa idéntica, en donde todas las partículas se mueven con la misma rapidez. Las velocidades de las partículas están dirigidas a lo largo de los enlaces de la red (Figura 7). En el modelo las seis direcciones posibles de movimiento de una partícula se enumeran en el sentido contrario al de las agujas del reloj.

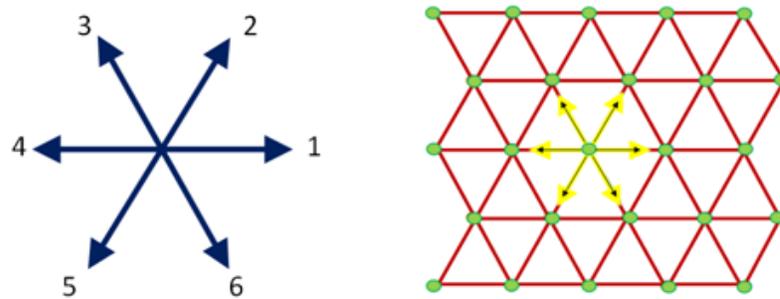


Figura 7. **Direcciones del vector velocidad dirigidas a lo largo de los enlaces de la red.**

3. Una fase espacio totalmente discreta (valores discretos (x, y)) y tiempo discreto.
4. Las reglas locales de interacción entre las partículas son un conjunto mínimo de normas de colisión que cumplen las leyes de conservación de energía, densidad y momento.
5. Finalmente, las partículas deben de obedecer el principio de exclusión. Este impide la presencia simultánea de dos o más partículas en el mismo nodo con velocidades idénticas.

II.2.2 Evolución del modelo

Como se mencionó, dos de las características del modelo es que el tiempo es discreto y que la evolución del modelo de celosías de gases se descompone en dos estados en cada

paso de tiempo. Ahora se presentan los detalles que caracterizan esos estados.

Estado uno: propagación de las partículas. Estas se mueven a nuevos sitios de acuerdo a sus direcciones de velocidades con respecto a sus posiciones anteriores (Figura 8).

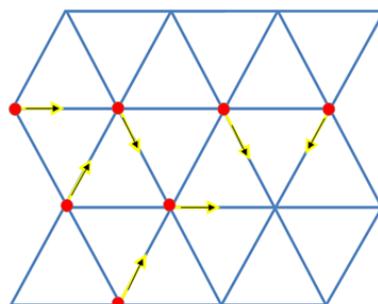


Figura 8. **Estado uno: propagación de las partículas.**

Estado dos: colisiones. Las partículas colisionan y se dispersan de acuerdo a reglas locales de interacción (Figura 9).

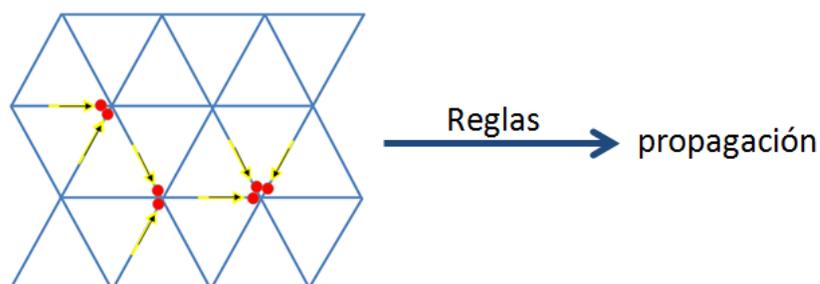


Figura 9. **Estado dos: colisión y dispersión de las partículas.**

II.2.3 Reglas locales de interacción

Las reglas locales de interacción entre las partículas deben cumplir las leyes de conservación de masa, energía y momento. Considerando que todas las partículas tienen la misma masa y velocidad, la conservación del momento y energía se reduce a la suma vectorial de las velocidades (Tabla I).

Tabla I. **Conservación de momento y energía.**

Conservación de momento	Conservación de energía
$p = mv$	$E_c = \frac{1}{2}mv^2$
$p^1 = p^2$	$E_c^1 = E_c^2$
$\sum_i p_i^1 = \sum_i p_i^2$	$\sum_i E_c^1 = \sum_i E_c^2$
$\sum_i v_i^1 m_i^1 = \sum_i v_i^2 m_i^2$	$\sum_i \frac{1}{2} m_i^1 (v_i^1)^2 = \sum_i \frac{1}{2} m_i^2 (v_i^2)^2$
$\sum_i v_i^1 m_i^1 = \sum_i v_i^2 m_i^2$	$\sum_i (v_i^1)^2 = \sum_i (v_i^2)^2$
$\sum_i v_i^1 - \sum_i v_i^2 = 0$	$\sum_i (v_i^1)^2 - \sum_i (v_i^2)^2 = 0$

En la Figura 10 se ilustra la colisión de dos partículas propagándose con direcciones de velocidad 1 y 2 hacia el centro de una vecindad hexagonal. Nótese que después de la colisión las partículas mantienen sus trayectorias. Este es el único estado que satisface balance de momento y energía. La Figura 11 muestra la misma interacción solo que ahora las gráficas se encuentran en un espacio del campo de velocidad. Obsérvese que en esta nueva representación el estado de pre y post colisión es el mismo. En adelante los diagramas de interacción sólo se presentan en el espacio del campo de velocidad, dado que simplifican la descripción de las interacciones.

El estado en cada nodo de la red de celosías de gases puede ser expresado con opera-

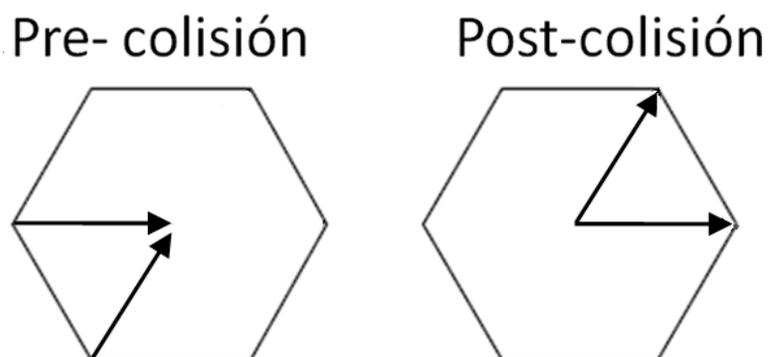


Figura 10. **Pre y post colisión en el espacio del campo de desplazamiento.**

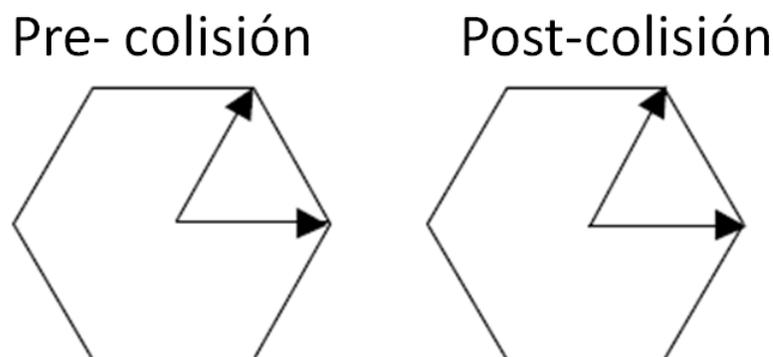


Figura 11. **Pre y post colisión en el espacio del campo de velocidad.**

ciones lógicas entre bits. Los estados de interacción se codifican con las variables $A - F$ que corresponden a los vértices de la región hexagonal. A cada vértice le corresponde una dirección de velocidad (Figura 12). Adicionalmente se incluyen dos bits S y R , donde S indica la presencia de sólido y R es un bit aleatorio, los cuales se explican más adelante. La Figura 13 muestra el valor decimal que le corresponde a cada variable.

Las variables $A - F$ se pueden codificar en una cadena de bits en donde cada vértice de la vecindad hexagonal de un nodo de la red triangular puede tomar el valor de 1 o 0

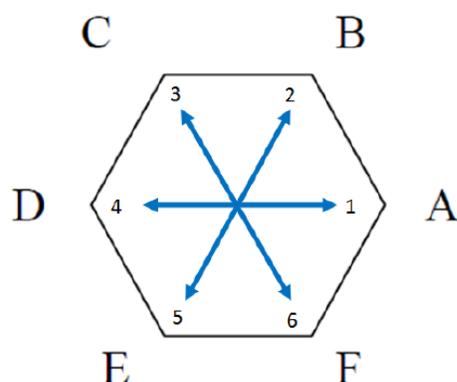


Figura 12. Las variables A-F describen las direcciones en las que una partícula de la celosía triangular mostrada en la Figura 6 se puede propagar.

	Valores decimales de los bits							
	128	64	32	16	8	4	2	1
A	0	0	0	0	0	0	0	1
B	0	0	0	0	0	0	1	0
C	0	0	0	0	0	1	0	0
D	0	0	0	0	1	0	0	0
E	0	0	0	1	0	0	0	0
F	0	0	1	0	0	0	0	0
S	0	1	0	0	0	0	0	0
R	1	0	0	0	0	0	0	0

Figura 13. Valores decimales correspondientes a las variables A–F y adicionalmente el valor decimal de S y R.

dependiendo si la partícula se mueve o no en esa dirección. El simple esquema anterior es extensible y puede describir el movimiento de hasta seis partículas a la vez. Las combinaciones posibles de interacción se muestran a continuación:

1. Una partícula por nodo: la partícula puede tomar una de las seis direcciones posibles (Figura 14). Además el estado de post-colisión es el mismo que el estado de pre-colisión.

Número de partículas	Estado pre-colisión	Cadena de bits Pre-colisión						Estado post-colisión	Cadena de bits Post-colisión					
		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)
1		0	0	0	0	0	1		0	0	0	0	0	1
		0	0	0	0	1	0		0	0	0	0	1	0
		0	0	0	1	0	0		0	0	0	1	0	0
		0	0	1	0	0	0		0	0	1	0	0	0
		0	1	0	0	0	0		0	1	0	0	0	0
		1	0	0	0	0	0		1	0	0	0	0	0

Figura 14. **Configuración pre y post colisión de una partícula.**

2. Dos partículas por nodo: la Figura 15 muestra las combinaciones para el estado de pre-colisión. Velocidades iniciales separadas por ángulos de 60° y 120° tienen el mismo estado de post-colisión. Para dos partículas separadas 180° su estado de post-colisión cambia.
3. Tres partículas por nodo: la Figura 16 muestra los estados que las partículas pueden tomar. Estado de pre-colisión con velocidades iniciales separadas por ángulos de 60° tienen el mismo estado de post-colisión. La configuración con ángulos de separación de 60° - 120° y ángulos de 120° - 120° cambian sus estados de post-colisión.
4. Cuatro partículas por nodo: la Figura 17 muestra las combinaciones que se pueden formar cuando interactúan cuatro partículas. Los estados de pre-colisión con velo-

Número de partículas	Estado pre-colisión	Cadena de bits Pre-colisión						Estado post-colisión	Cadena de bits Post-colisión					
		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)
2		0	0	0	0	1	1		0	0	0	0	1	1
		0	0	0	1	0	1		0	0	0	1	0	1
		0	0	1	0	0	1		0	1	0	0	1	0

Figura 15. Configuración pre y post colisión de dos partículas.

Número de partículas	Estado pre-colisión	Cadena de bits Pre-colisión						Estado post-colisión	Cadena de bits Post-colisión					
		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)
3		0	0	0	1	1	1		0	0	0	1	1	1
		0	0	1	0	1	1		1	0	0	1	1	0
		0	1	0	1	0	1		1	0	1	0	1	0

Figura 16. Configuración pre y post colisión de tres partículas.

configuraciones iniciales separadas por ángulos de 60° y ángulos de 60° - 60° - 120° tienen los mismos estados de post-colisión. Para los estados de pre-colisión con configuración de velocidades iniciales separada por ángulos de 60° - 120° - 60° - 120° cambia su estado de post-colisión.

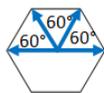
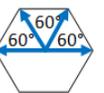
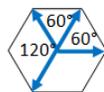
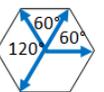
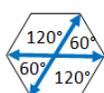
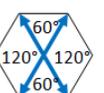
Número de partículas	Estado pre-colisión	Cadena de bits Pre-colisión						Estado post-colisión	Cadena de bits Post-colisión					
		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)
4		0	0	1	1	1	1		0	0	1	1	1	1
		0	1	0	1	1	1		0	1	0	1	1	1
		0	1	1	0	1	1		1	1	0	1	1	0

Figura 17. Configuración pre y post colisión de cuatro partículas.

5. Cinco y seis partículas por nodo: la Figura 18 muestra los estados que pueden formar las interacciones de cinco y seis partículas. Los estados de pre-colisión son los mismos que los estados de post-colisión.

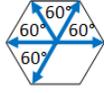
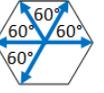
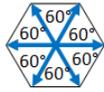
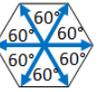
Número de partículas	Estado pre-colisión	Cadena de bits Pre-colisión						Estado post-colisión	Cadena de bits Post-colisión					
		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)		F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)
5		0	1	1	1	1	1		0	1	1	1	1	1
6		1	1	1	1	1	1		1	1	1	1	1	1

Figura 18. Configuración pre y post colisión de cinco y seis partículas.

Todos los estados posibles de los gases de red hexagonal se muestran en la Figura 19 de estados de pre-colisión. Las casillas en blanco corresponden con estados que no se alteran durante las colisiones. Los casos específicos que cambian su estado de post-colisión se muestran en gris.

Cada estado puede expresarse en notación de 6 bits (una combinación de 3 bits de la derecha y 3 bits a la izquierda). Por ejemplo, el estado vacío está escrito por (000.000) y el estado máximo ocupado se encuentra en la esquina inferior derecha de la tabla por escrito por (111, 111).

	000	001	010	011	100	101	110	111
000	0	1	2	3	4	5	6	7
001	8	9	10	11	12	13	14	15
010	16	17	18	19	20	21	22	23
011	24	25	26	27	28	29	30	31
100	32	33	34	35	36	37	38	39
101	40	41	42	43	44	45	46	47
110	48	49	50	51	52	53	54	55
111	56	57	58	59	60	61	62	63

Figura 19. Combinaciones posibles de pre-colisiones. Los de la parte superior corresponden a las variables ABC y los bits de la izquierda corresponden a las variables DEF . El número en la esquina inferior derecha corresponde al número decimal. Los estados en sombreado gris corresponden a los estados que cambian su estado de post-colisión (Cooper et al., 1989).

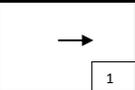
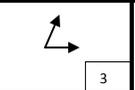
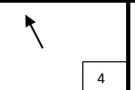
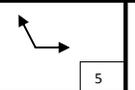
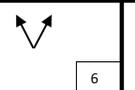
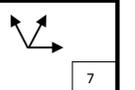
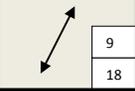
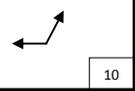
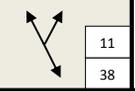
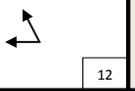
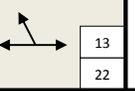
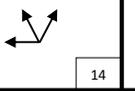
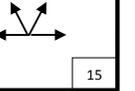
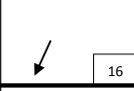
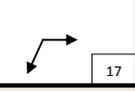
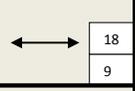
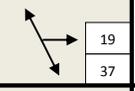
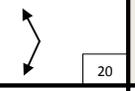
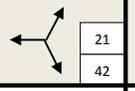
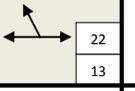
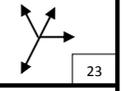
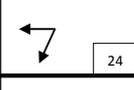
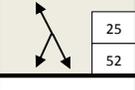
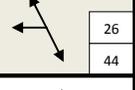
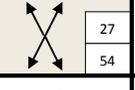
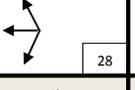
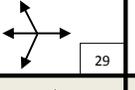
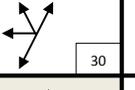
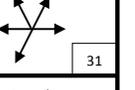
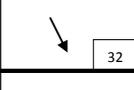
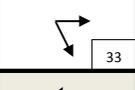
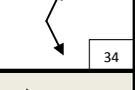
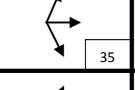
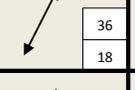
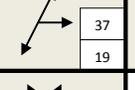
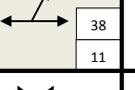
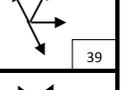
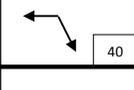
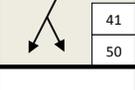
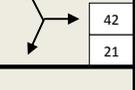
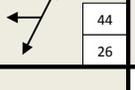
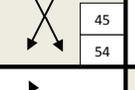
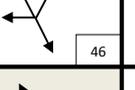
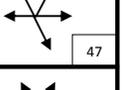
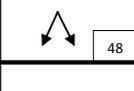
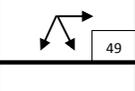
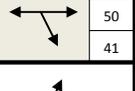
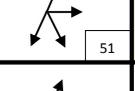
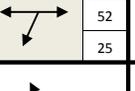
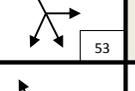
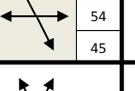
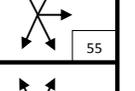
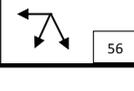
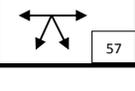
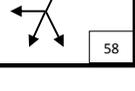
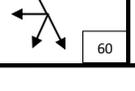
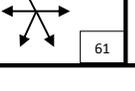
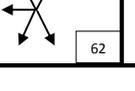
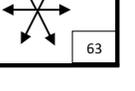
 0	 1	 2	 3	 4	 5	 6	 7
 8	 9 18	 10	 11 38	 12	 13 22	 14	 15
 16	 17	 18 9	 19 37	 20	 21 42	 22 13	 23
 24	 25 52	 26 44	 27 54	 28	 29	 30	 31
 32	 33	 34	 35	 36 18	 37 19	 38 11	 39
 40	 41 50	 42 21	 43	 44 26	 45 54	 46	 47
 48	 49	 50 41	 51	 52 25	 53	 54 45	 55
 56	 57	 58	 59	 60	 61	 62	 63

Figura 20. **Combinaciones posibles de post-colisiones.** El recuadro de la esquina inferior derecha muestra el número en decimal de post-colisión. Los casos donde no cambia su estado de pre y post colisión solo se muestra un número. Los estados que cambian se presentan dos números el superior es el número de pre-colisión y el inferior corresponde al número de post-colisión.

El séptimo bit S como se mencionó indica la presencia de sólido, como las partículas no pueden atravesar el sólido rebotan en la superficie del sólido cambiano su dirección 180° (Figura 21).

El octavo bit R toma el valor de 0 o 1 al azar para decidir entre los estados alternativos de post-colisión. Por ejemplo, el caso 9 decimal tiene dos estados post-colisión que conservan momento como se muestra en la Figura 22. En este caso el bit aleatorio sirve para decidir entre estos dos estados posibles.

		Cadena de bits Pre-colisión							
Número decimal	R (128)	S (64)	F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)	
64	0	1	0	0	0	0	0	0	
65	0	1	0	0	0	0	0	1	
66	0	1	0	0	0	0	1	0	
...									
127	0	1	1	1	1	1	1	1	

		Cadena de bits Post-colisión							
Número decimal	R (128)	S (64)	F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)	
64	0	1	0	0	0	0	0	0	
72	0	1	0	0	1	0	0	0	
80	0	1	0	1	0	0	0	0	
...									
127	0	1	1	1	1	1	1	1	

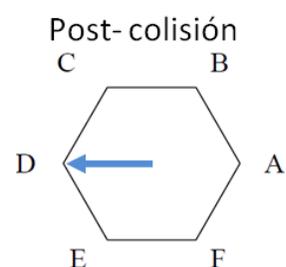
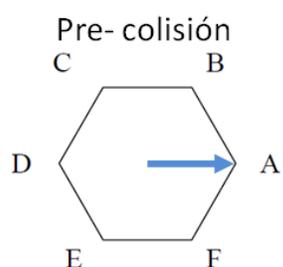


Figura 21. Regla local de interacción en la presencia de sólido. La partícula que colisiona con un sólido en A rebota y ahora va en dirección hacia D

		Cadena de bits Pre-colisión							
Número decimal	R (128)	S (64)	F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)	
9	0	0	0	0	1	0	0	1	
137	1	0	0	0	1	0	0	1	

		Cadena de bits Post-colisión							
Número decimal	R (128)	S (64)	F (32)	E (16)	D (8)	C (4)	B (2)	A (1)	
18	0	0	0	1	0	0	1	0	
164	1	0	1	0	0	1	0	0	

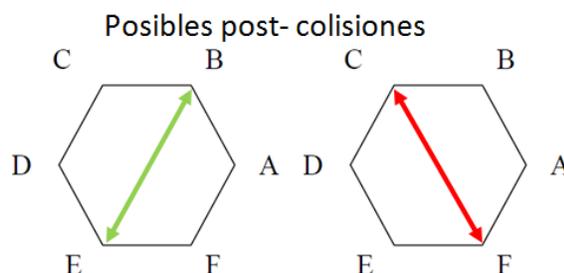
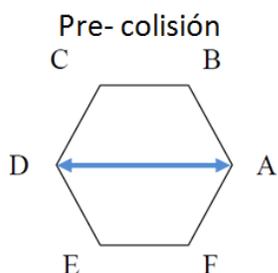


Figura 22. Regla local de interacción para decidir entre los estados alternativos de post-colisión.

II.3 Condiciones de frontera

El modelo requiere de un número finito de nodos. Esto lleva a considerar lo que debe suceder a las partículas que se encuentren en los bordes de la retícula. La implementación de una o varias consideraciones específicas en los bordes de la retícula se le conoce como condición de frontera. A continuación se enumeran algunos ejemplos de condiciones de frontera :

1. Frontera periódica. Se considera que los nodos en el límite de la malla están interactuando con los nodos localizados en la frontera del límite opuesto. El sistema entonces es cerrado sin bordes. La Figura 23 muestra las dos topologías posibles de fronteras periódicas.

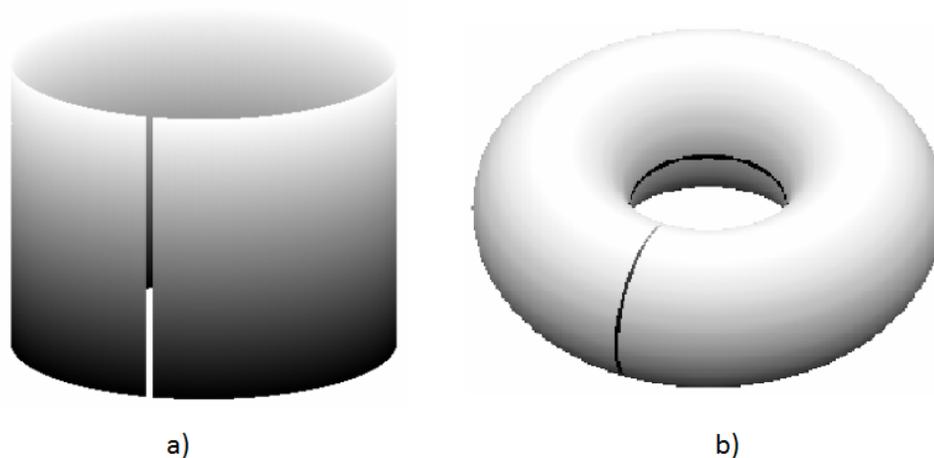


Figura 23. **Condiciones de frontera del modelo FHP.** *a)* En la topología cilíndrica las fronteras son periódicas en una sola dirección. *b)* En la topología toroidal las fronteras son periódicas en ambas direcciones.

2. Frontera reflectora. La incorporación de sólido en los nodos de la frontera permite bordes donde las partículas rebotan y quedan dentro de la malla. El sistema es, una vez más, cerrado.

3. Frontera abierta. Se considera que las partículas escapan por los nodos en el límite de la malla, se puede asumir que las partículas siguen interactuando fuera de la malla. En este caso el sistema es termodinámicamente abierto.

II.4 Implementación del modelo

El modelo se codificó en el lenguaje de programación C (Kerrigan y Ritchie, 1978). Este lenguaje tiene la ventaja de utilizar un número reducido de instrucciones y ser altamente modular. Otra ventaja es que los ejecutables son pequeños con tiempo de ejecución pequeños comparados contra otros lenguajes interpretes como Matlab, Basic o Python.

Como ejemplo, se muestra el código de la función que asigna aleatoriamente la velocidad y posteriormente la función se ejecuta cuando es invocada en el código principal (Figura 24).

```
void inicializarVelocidad ( int velocidad [ ] , int numParticulas )
{
    int i ;

    for ( i = 0 ; i < numParticulas; i++ )
    {
        velocidad [ i ] = 1 + rand( ) % 6 ;
    }
}

// Invocación de la función :

inicializarVelocidad ( velocidad , numParticulas );
```

Figura 24. **Codificación de función en lenguaje C.**

El compilador utilizado fué gcc versión 4.2, el cual permite, además, de utilizar opciones de optimización y paralelización automática.

El código con la implementación del modelo consiste de tres secciones: pre-procesado, procesado y post-procesado. A continuación se describen brevemente estas tres secciones:

1. Pre-procesado. Aquí se introducen las variables y parámetros del modelo, tales como el tamaño de la malla, número de pasos en el tiempo, la colocación inicial de las partículas y su dirección de la velocidad asignada de forma aleatoria. Inicia la propagación de partículas (Figura 25).

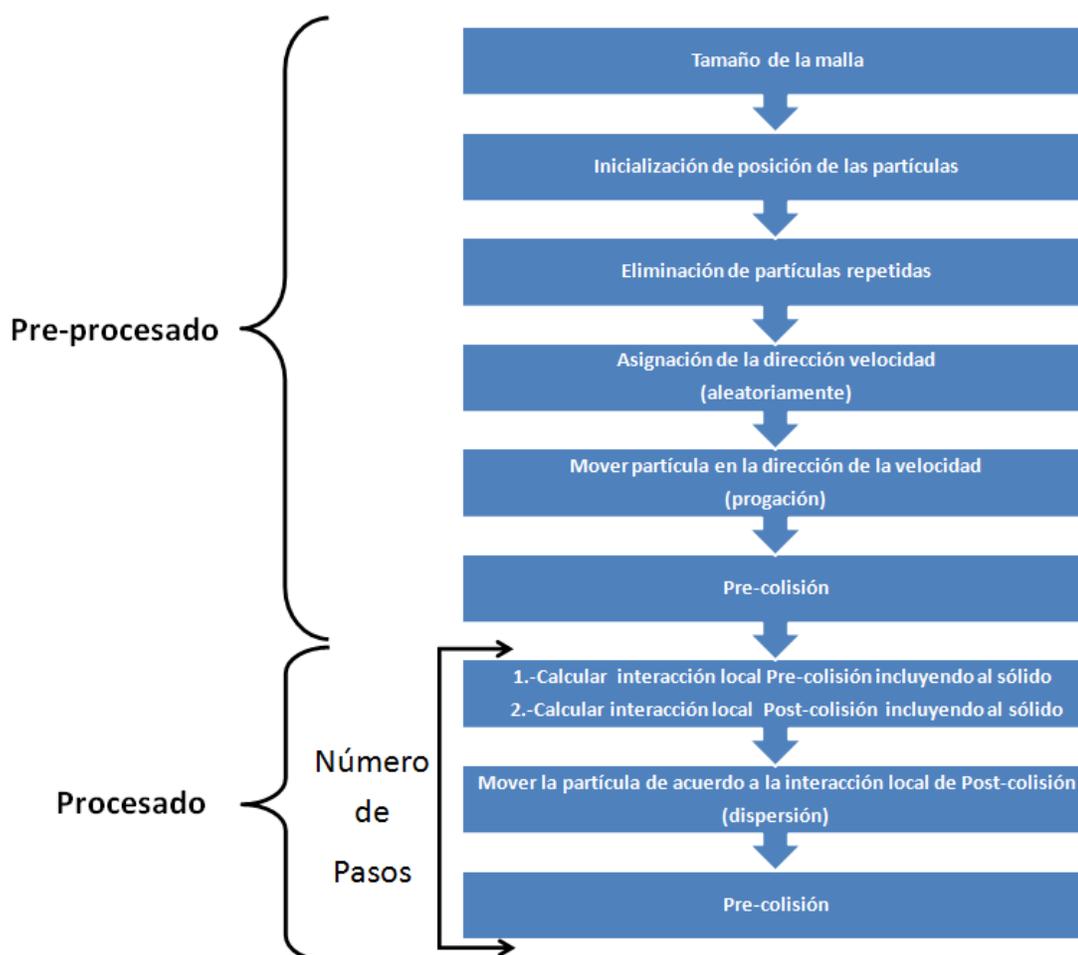


Figura 25. **Algoritmo general.** Las instrucciones que se encuentran entre las flechas se repiten de acuerdo al número de pasos en el tiempo establecido.

2. Procesado. Se llevan a cabo las colisiones entre las partículas en los nodos de la malla. Se aplican las reglas locales de interacción y se dispersan las partículas. Este proceso se repite para cada paso de tiempo (Figura 25).
3. Post-Procesado. Se generan archivos de texto de salida.

La visualización de los resultados se realizó en Matlab y en OpenDX (www.opendx.org). En la Figura 26 se muestra un ejemplo de visualización con OpenDX. La figura muestra un ciclo de propagación-colisión-dispersión en el que 100 partículas inicialmente se encuentran colocadas en los nodos de la red en una región cuadrada de 10 por 10 nodos con fronteras periódicas. A las partículas se les asigna la dirección de velocidad de propagación aleatoriamente (Figura 26a). Algunas partículas colisionan con otras partículas (Figura 26b). En estos casos se aplican las reglas locales de interacción y con las velocidades asignadas por las colisiones las partículas se dispersan (Figura 26c y 26d).

II.4.1 Implementación del sólido

Como se mencionó anteriormente el modelo FHP tiene la capacidad de incorporar sólidos y generar un medio poroso. Con este se puede simular los detalles de flujo y transporte en los espacios del medio poroso. El medio poroso está constituido por dos fases: una matriz sólida y en su interior un sistema de poros que pueden o no estar conectados entre sí. En la Figura 27 se muestra una representación de un medio poroso.

La implementación del sólido es simple, al algoritmo mostrado en la Figura 25 se le introduce una subrutina en la sección de pre-procesado que genera el medio poroso a través del cual las partículas pasarán (Figura 28).

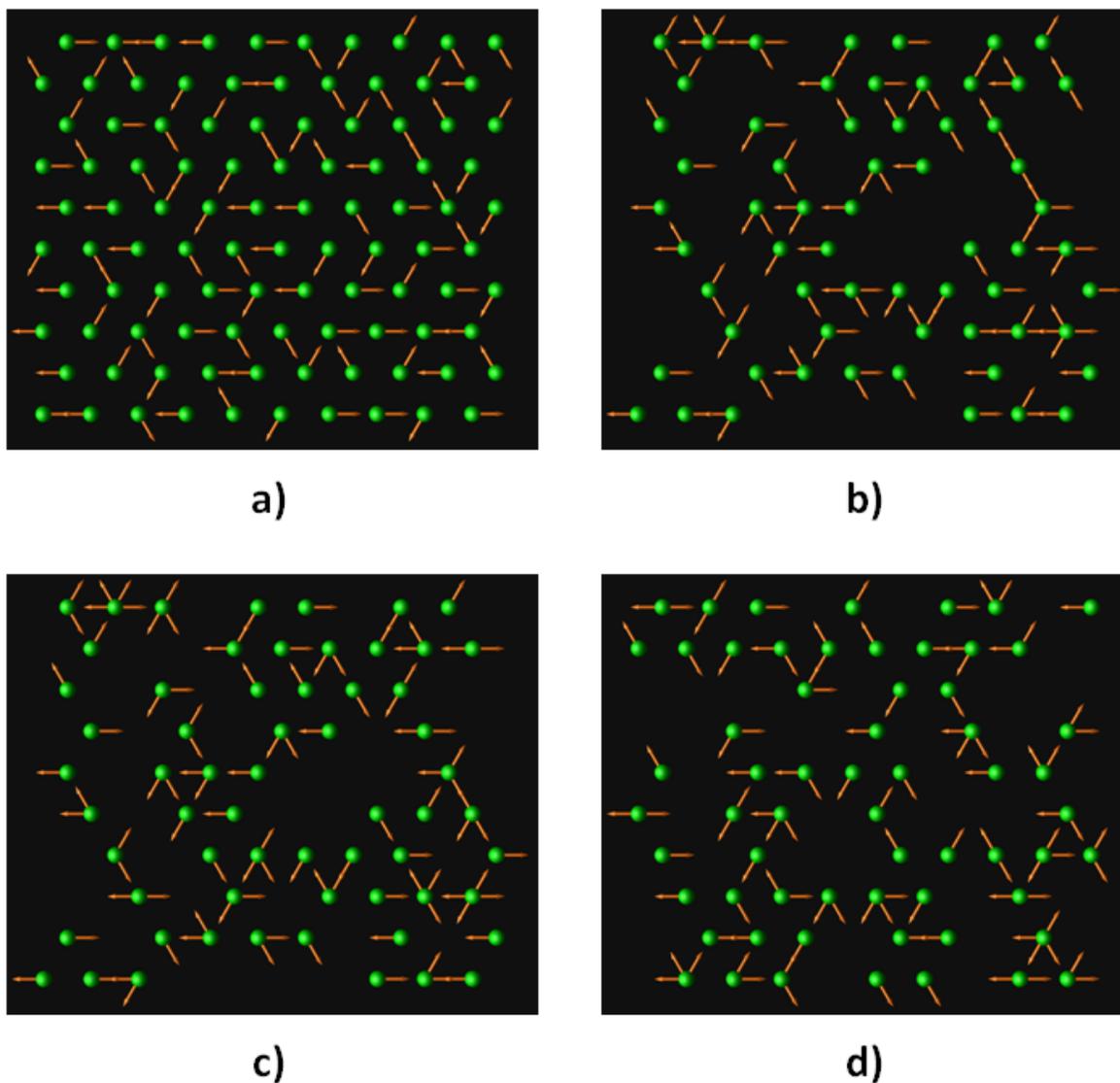


Figura 26. Visualización de la interacción de 100 partículas con OpenDX. Las partículas están representadas por las esferas verdes y las flechas corresponden al vector de velocidad. *a)* Propagación: inicialmente las partículas están dispuestas en la red hexagonal. A cada partícula se le asignó una velocidad de propagación aleatoria. *b)* Colisión: ahora las partículas se encuentran en la posición de acuerdo al vector de velocidad inicial; algunas partículas colisionan. *c)* Reglas locales de interacción: las partículas que colisionan se les aplica las reglas locales de interacción descritas en las Figuras 19 y 20. *d)* Dispersión: las partículas ahora se dispersan de acuerdo a los vectores de velocidad calculados con las reglas locales de interacción.

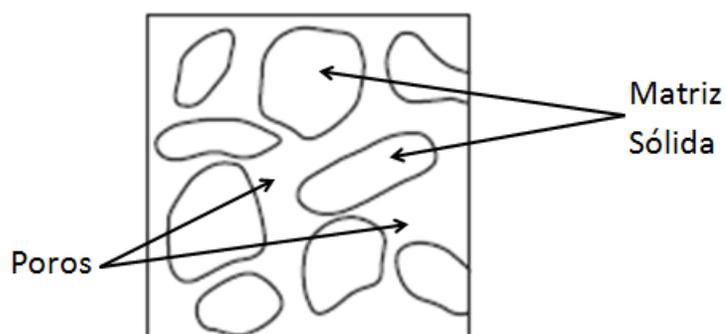


Figura 27. Dibujo representando las dos fases del medio poroso, la matriz sólida y los poros.

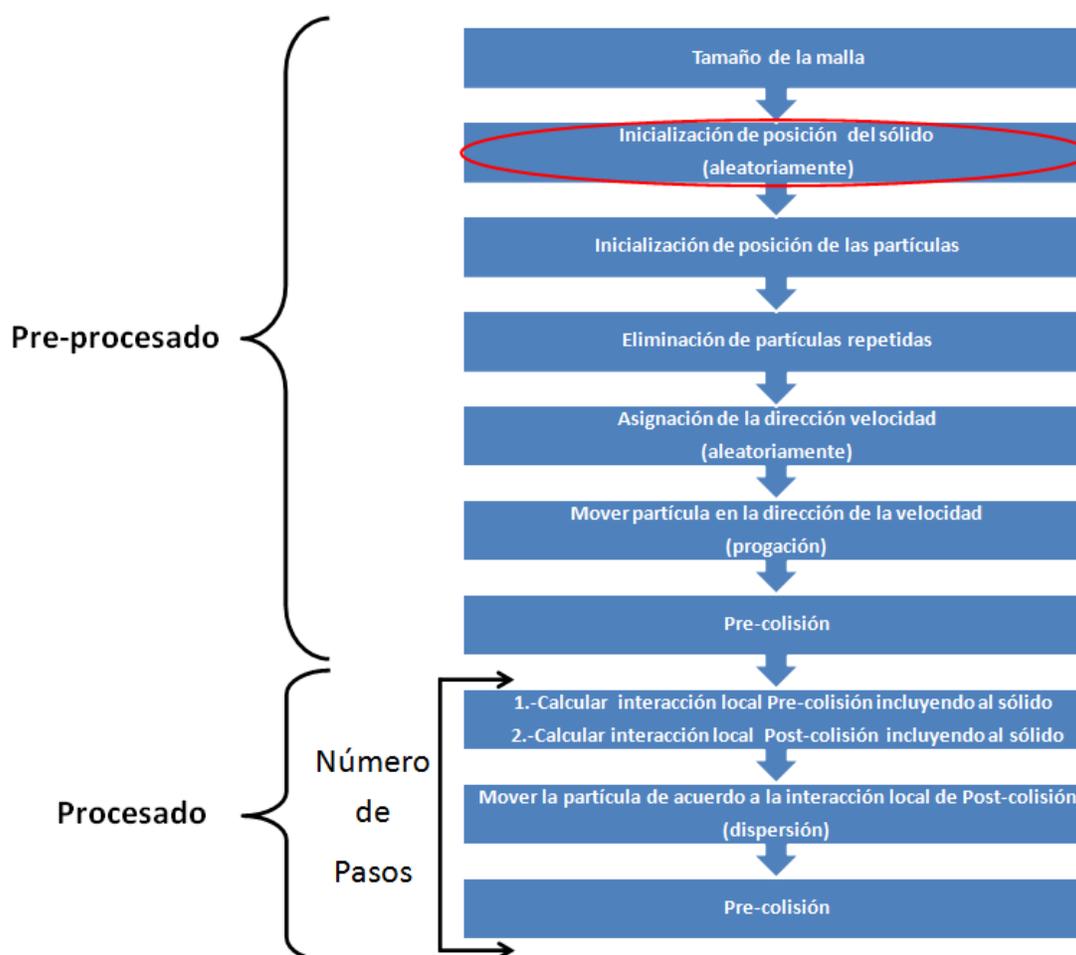


Figura 28. Implementación del sólido al algoritmo principal

La inicialización del vector de posición del sólido se realiza aleatoriamente eligiendo entre cero para ausencia de sólido y uno para presencia de sólido, como en la siguiente instrucción: $Solido[i] = (rand()\%100) < 50$. Con esta instrucción podemos indicar el porcentaje de sólido en la malla, en este caso es el 50%. La estructura resultante se muestra en la Figura 29.

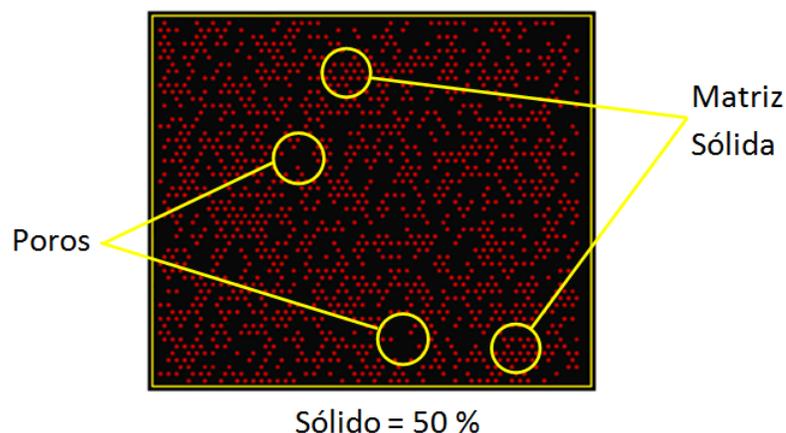


Figura 29. **Medio poroso con estructura aleatoria generado con el algoritmo descrito en la sección II.4.1.**

La Figura 30 es un ejemplo del flujo en un medio poroso generado con el modelo. La figura muestra un ciclo de propagación-colisión-dispersión en el que 19 partículas inicialmente se encuentran colocadas aleatoriamente en los nodos de la red hexagonal en una región cuadrada de 10 por 10 nodos con fronteras periódicas. A las partículas se les asigna la dirección de velocidad de propagación aleatoriamente. El medio poroso generado consta de un 50% de sólido, es decir, del total de nodos de la malla el 50% de los nodos está ocupado por sólidos. Algunas partículas colisionaron con otras partículas en estos casos se aplican las reglas locales de interacción descritas en las Figuras 19 y 20 y otras partículas colisionan con el sólido en estos casos se aplican las reglas locales de interacción descritas en la Figura 21.

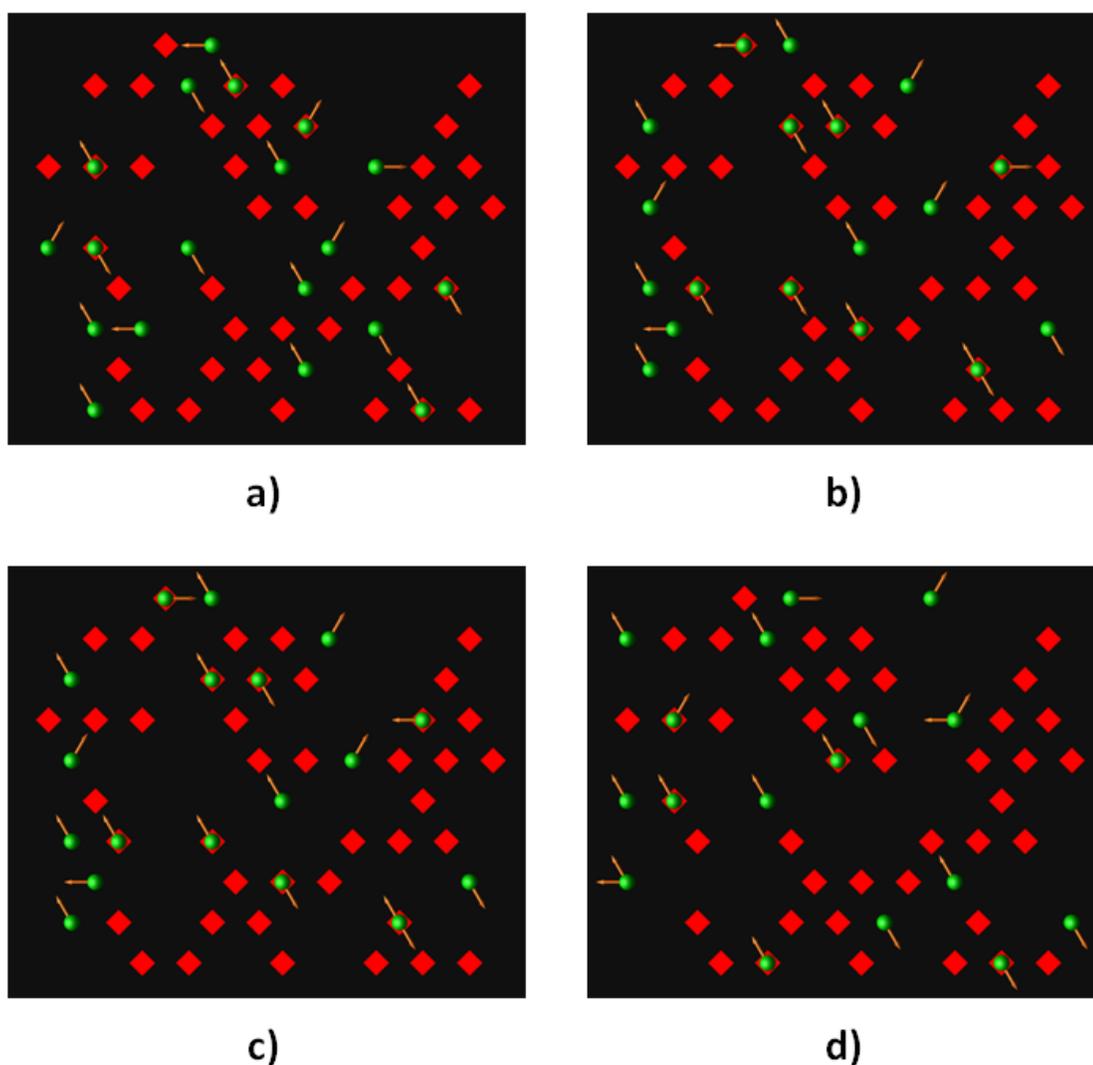


Figura 30. Simulación del flujo en un medio poroso. Las partículas están representadas por las esferas verdes, las flechas corresponden al vector de velocidad y los rombos rojos representan al sólido (el sólido está colocado aleatoriamente). *a)* Propagación: inicialmente las partículas están dispuestas de aleatoriamente en los nodos de la red hexagonal. A cada partícula se le asignó una velocidad de propagación aleatoria. *b)* Colisión: ahora las partículas se encuentran en la posición de acuerdo al vector de velocidad inicial; algunas partículas colisionan entre ellas y otras colisionan con el sólido. *c)* Reglas locales de interacción: las partículas que colisionan entre ellas se les aplica las reglas locales de interacción descritas en las Figuras 19 y 20. Las partículas que colisionan con el sólido se les aplica las reglas locales de interacción descritas en la Figura 21. *d)* Dispersión: las partículas ahora se dispersan de acuerdo a los vectores de velocidad calculados con las reglas locales de interacción.

II.5 Densidad

Uno de los parámetros más importantes que nos permite caracterizar la evolución de un sistema es la densidad. Esta es una cantidad fundamental de la física que permite establecer flujos y fuerzas de origen termodinámico como presión y la energía interna del sistema. En el modelo este parámetro está dado por la razón entre la cantidad de partículas y el área que las contiene.

$$densidad = \frac{No.Particulas}{area_{hexagonal}}. \quad (31)$$

A manera de ejemplo, a continuación se muestra el comportamiento de un experimento numérico para 5 y 10 pasos en el tiempo. La malla del experimento consta de 100 renglones y 100 columnas; en la región central están dispuestas 460 partículas formando una concentración inicial cuadrada (Figura 31). Las partículas en la posición inicial se muestran en color rojo y en color negro la posición de las partículas propagadas.

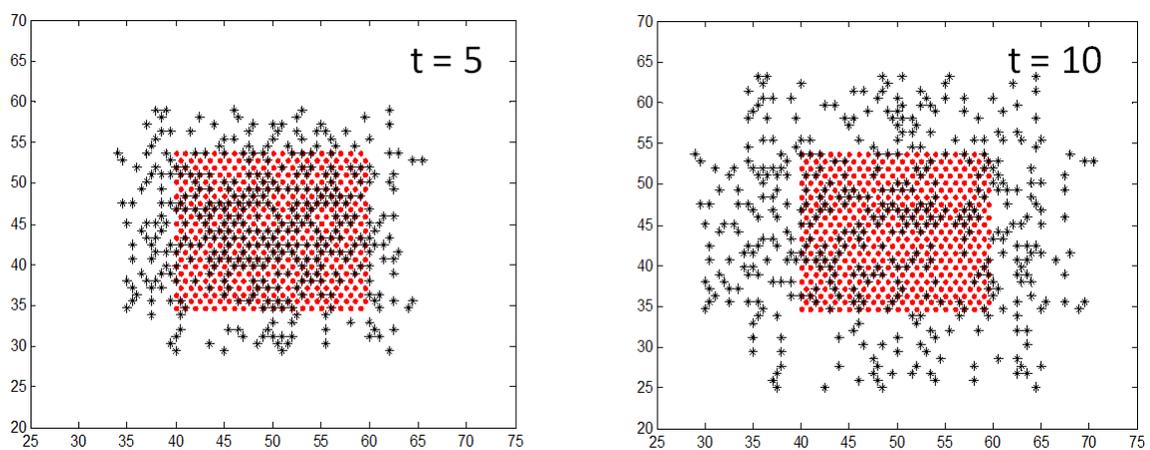
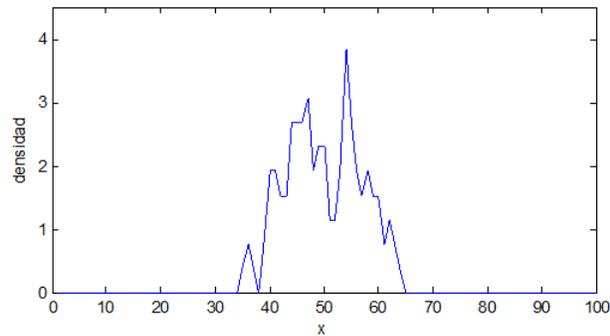


Figura 31. **Simulaciones con 5 y 10 pasos en el tiempo. En rojo la posición de las partículas inicialmente y en negro la posición de las partículas propagadas.**

La Figura 32 muestra la distribución de densidad para este experimento utilizando la ecuación (31) para caracterizar la densidad. Las gráficas muestran la densidad para 5 y 10 pasos en el tiempo. Se puede apreciar que la densidad calculada con la relación 31 es inestable ya que muestra fuertes variaciones espaciales. Esto se debe a que el calculo (31) esta en la escala de partícula.

t = 5



t = 10

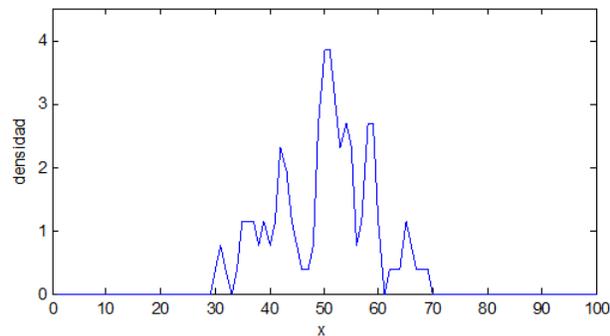


Figura 32. **Corte de la distribución de densidad para el modelo de la Figura 31. Nótese que la densidad muestra fuertes variaciones debido a que el calculo esta en la escala de partícula.**

En general, los procesos se miden a escala macroscopica y lo que seguimos son promedios calculados sobre esa escala. Por lo tanto un cambio de escala, de partícula a escala macroscopica es necesario para poder hacer comparaciones realistas y estabilizar el cálculo de la densidad. Para efectuar este cálculo de densidad se construyó una

nueva malla con dimensiones $dx = dy \gg \text{arista hexagono}$ que se superpuso a la malla hexagonal sobre la que operan las partículas. Además, por simplicidad, el área de promediado se consideró como un círculo (Figura 33).

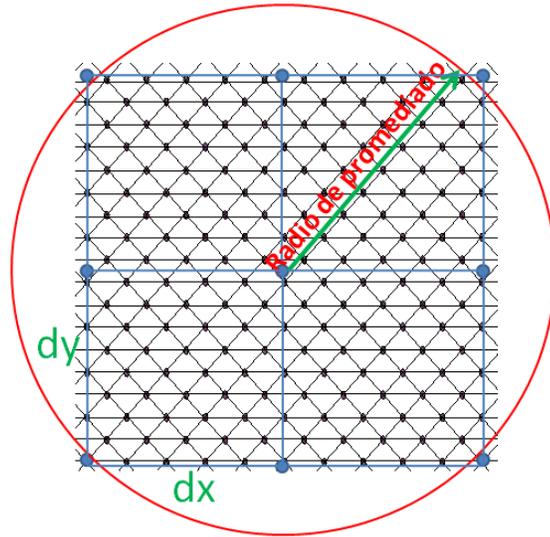
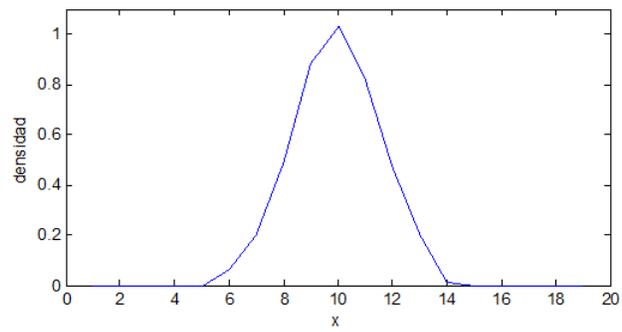


Figura 33. **Área de promediado superpuesta a la malla hexagonal.**

Esta nueva caracterización de densidad se aplicó a la simulación mostrada en la Figura 32. Las dimensiones de la nueva malla son $dx = dy = 5 \text{ aristas}$ y el radio de promediado es de 7 aristas de la red hexagonal. Los resultados se muestran en la Figura 34: la distribución de densidad es suave, cuasi-gaussiana y estable, sin altas frecuencias.

t = 5



t = 10

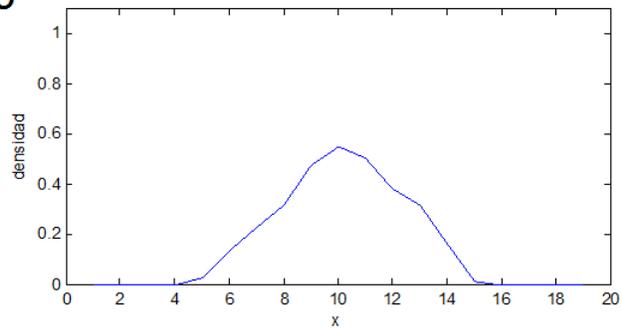


Figura 34. Distribución de densidad calculada con la nueva malla mostrada en la Figura 33. Ahora la distribución es suave y sin altas frecuencias.

Capítulo III

ANÁLISIS DE CONVERGENCIA DEL MODELO

III.1 Introducción

En el capítulo anterior se describió la implementación del modelo de celosías de gases FHP. Ahora se aplicará el modelo para obtener soluciones numéricas de problemas de valores iniciales y de frontera con solución analítica conocidas. La solución numérica se obtiene con la implementación de los algoritmos mostrados en las Figuras 25 y 28. Esta implementación esta basada en operaciones aritméticas y lógicas entre bits que reproducen el comportamiento colectivo de un grupo de partículas. La solución analítica, por otra parte, se obtiene de soluciones de ecuaciones diferenciales promediadas (como las ecuaciones 4, 5, 6 y 10) y están expresadas en términos de funciones elementales conocidas que describen la evolución de campos físicos en la macroescala.

Es evidente que ambas soluciones deberán mostrar similitud cuando ambos modelos están sujetos a condiciones iniciales y de frontera similares. A la comparación entre modelos numéricos y analíticos se le conoce como análisis de convergencia se dice que una solución numérica converge a la solución analítica cuando, para cada punto (en el espacio de variables), la primera es lo suficientemente cercana a la segunda. Ahora bien, la solución numérica diferirá de la solución analítica debido a la manera diferente de caracterizar el problema, a inestabilidades por los esquemas numéricos empleados, o por artificios introducidos en la discretización de proceso. La manera de cuantificar

la discrepancia entre la solución numérica y la analítica es a través del residual. El residual porcentual se calcula de la siguiente forma:

$$residual_i = \left(\frac{ValorSimulacion_i - ValorAnalitico_i}{ValorAnalitico_i} \right) * 100\% \quad (32)$$

donde i corresponde a cada dato.

III.2 Soluciones analíticas de la ecuación de difusión

Antes de comenzar con el análisis de convergencia es conveniente recordar la ecuación que gobierna el proceso difusivo y algunas de sus soluciones. La ecuación de difusión fue descrita en el capítulo I, ahora reescribimos la ecuación 4 de la siguiente manera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (33)$$

donde C es la concentración y D es el coeficiente de difusión. La ecuación 33 es conocida como ecuación de difusión unidimensional o segunda ley de Fick. Existen numerosas soluciones analíticas para esta ecuación, las soluciones dependen de las condiciones iniciales y condiciones de frontera. Ahora se describirán dos situaciones de interés que son fácilmente reproducibles con el modelo FHP.

III.2.1 Solución analítica para dominio infinito

La solución analítica para la ecuación de difusión en un dominio infinito con una concentración inicial instantánea descrita por una función impulso es:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2\sqrt{(\pi Dt)}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (34)$$

donde C_0 es la concentración inicial. La Figura 35 muestra en color rojo la concentración instantánea inicial C_0 y en negro las curvas calculadas con la solución analítica descrita por la ecuación 34. Esta solución predice una propagación infinita cuando $t \rightarrow \infty$ de una cantidad finita de substancia.

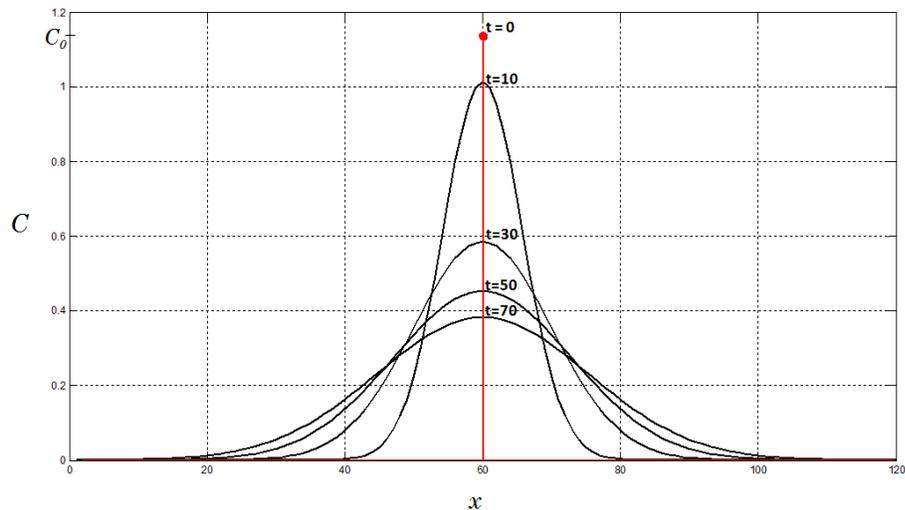


Figura 35. **Solución analítica para condiciones de frontera infinitas y concentración inicial C_0 instantánea. En color rojo la concentración instantánea inicial C_0 y en negro las curvas calculadas con la solución analítica mostrada en la ecuación 34.**

III.2.2 Solución analítica para una concentración inicial distribuida en una longitud finita

La solución analítica de la ecuación de difusión para una concentración distribuida en una región $-\frac{l}{2} < x < \frac{l}{2}$ descrita por una función caja en un dominio infinito esta dada por la expresión

$$C(x, t) = C_b + \frac{C_i - C_b}{2} \left(\operatorname{erf} \frac{0.5l - x}{\sqrt{4Dt}} + \operatorname{erf} \frac{0.5l + x}{\sqrt{4Dt}} \right) \quad (35)$$

En donde erf es la función error. Esta expresión resulta de integrar la solución (34) sobre la distribución inicial de la concentración

$$C(x, t) = \int_{\xi=-\frac{l}{2}}^{\xi=\frac{l}{2}} \frac{C_0}{2\sqrt{(\pi Dt)}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}} d\xi \quad (36)$$

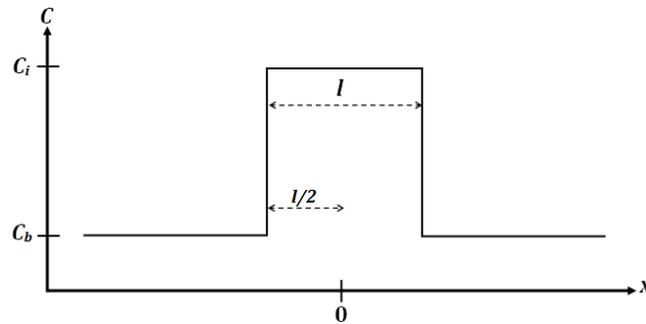


Figura 36. **Condiciones iniciales para la solución analítica para una concentración inicial distribuida en una longitud finita.**

La Figura 37 muestra la solución analítica dada por la ecuación 35 para varios tiempos. En color rojo la concentración inicial en forma de función caja y en negro las curvas calculadas con la solución analítica.

Al igual que la solución anterior, esta expresión predice una propagación difusiva infinita cuando $t \rightarrow \infty$ de una cantidad finita de substancia.

III.2.3 Simulación numérica de la difusión de una concentración inicial en forma de función caja

Se realizó una simulación con 2850 partículas dispuestas en un área rectangular de 50 por 57 nodos colocadas en el centro de la región simulada (Figura 38). En la simulación las fronteras son periódicas con topología toroidal. Como se pretende simular la difusión de la concentración inicial las velocidades de cada partícula fue asignada de aleatoriamente.

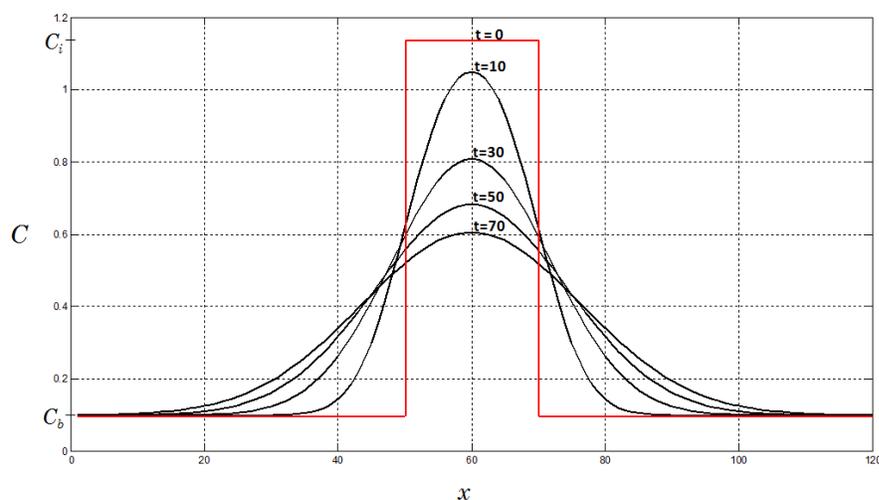


Figura 37. **Solución analítica para condiciones de frontera finitas y concentración inicial en forma de función caja. En color rojo la concentración inicial y en negro las curvas calculadas con la solución analítica.**

Con esto se garantiza que las partículas colisionan al azar entre sí, describiendo las partículas un movimiento browniano. Se aplicó la caracterización de densidad mostrada en la Figura 33 con un radio de promediado de 7 unidades, $dx = dy = 5$ unidades y 70 pasos en el tiempo.

En la Figura 39 se muestra la progresión del cambio de densidad para la experimento anterior en una serie de cortes en $y = 19$, en el intervalo $0 \leq x \leq 42$. La Figura 39 también contiene la solución analítica (ecuación 35) de la difusión de una concentración inicial dada por una función caja. La Tabla II lista los valores asignados a los parámetros libres del modelo analítico. Aquí hay que notar que la solución analítica esta definida en un dominio infinito mientras que la solución numérica esta definida en una región finita con condiciones de fronteras periódicas. Sin embargo, ambas soluciones deben ser comprobables en el centro de la región. El valor de D es unicamente para auto difusión (Sukop y Thorne, 2006).

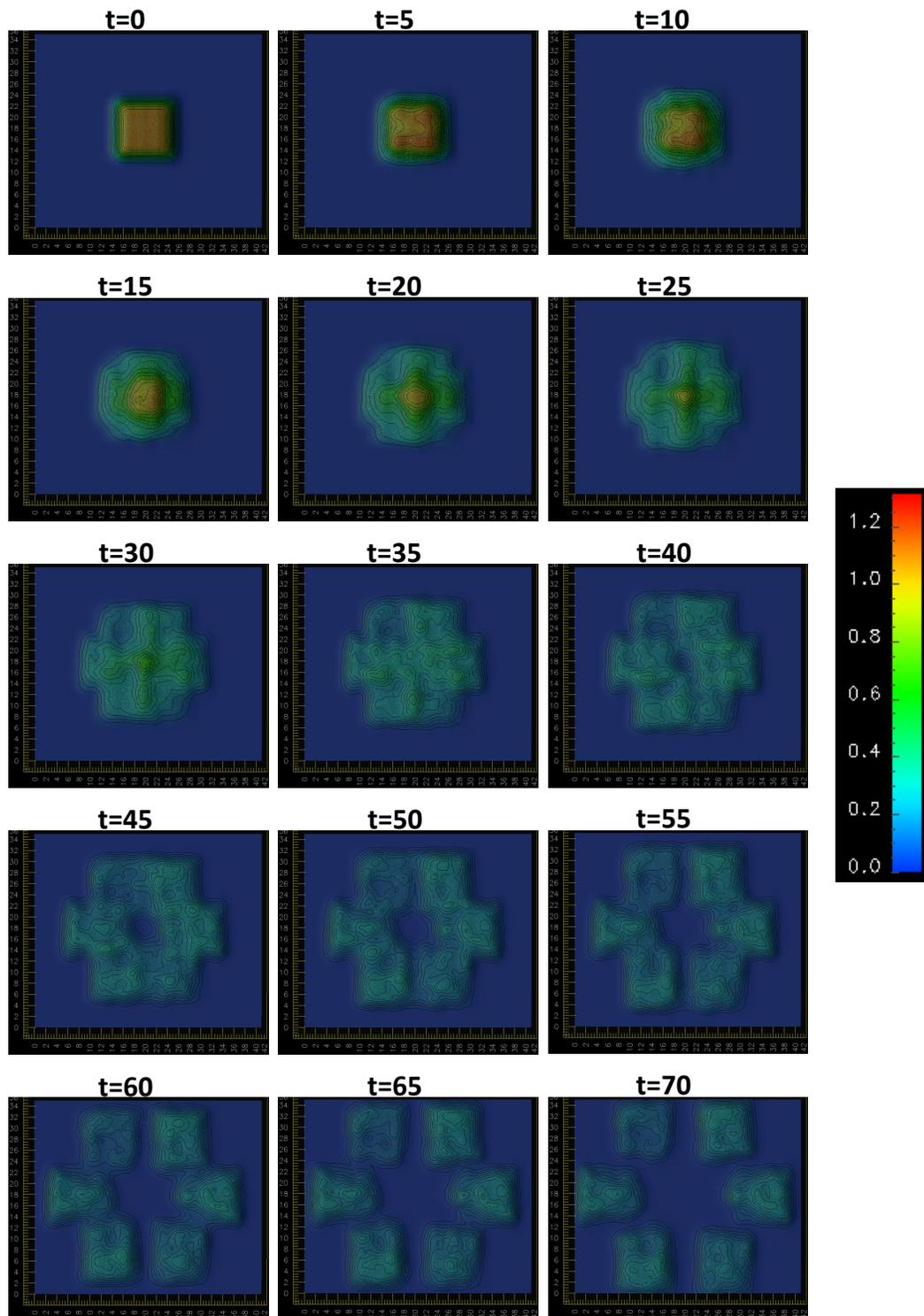


Figura 38. Experimento numérico de la dispersión de 2850 partículas dispuestas inicialmente en una área rectangular en el centro de la región simulada. Las fronteras son periódicas con topología toroidal.

Tabla II. **Valores utilizados en la solución analítica dada por la ecuación 35, cuando la concentración inicial tiene forma de función caja**

D	$\frac{1}{6} \approx 0.1666$
C_b	0
C_i	1.1368
$\frac{C_i}{2}$	0.5684
l	9.5

La solución analítica esta representada con la línea continua roja y la solución numérica esta representada con asteriscos azules. Podemos observar que la solución numérica se ajusta a la solución en los primeros 15 pasos en el tiempo. El ajuste es moderadamente bueno; los residuales se encuentran al nivel del 20% como se muestra en la Figura 39. De la distribución de densidad en esos 15 pasos es evidente que el proceso gobernante en la simulación numérica es difusivo. Sin embargo, a partir del paso 15 las soluciones divergen. Primero, a partir del paso 15 y hasta el 25 la concentración de partículas se separa en dos lóbulos que viajan en direcciones contrarias. Segundo, a partir del paso 30 las concentraciones en el modelo numérico se difunde más rápido que la solución analítica. Los residuales, por otra parte, aumentan hasta llegar al 100%.

III.2.4 Experimento numérico de la dispersión de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida

El experimento numérico anterior diverge en tiempos grandes del comportamiento difusivo esperado. Ahora se presenta un nuevo experimento numérico en donde se incluye

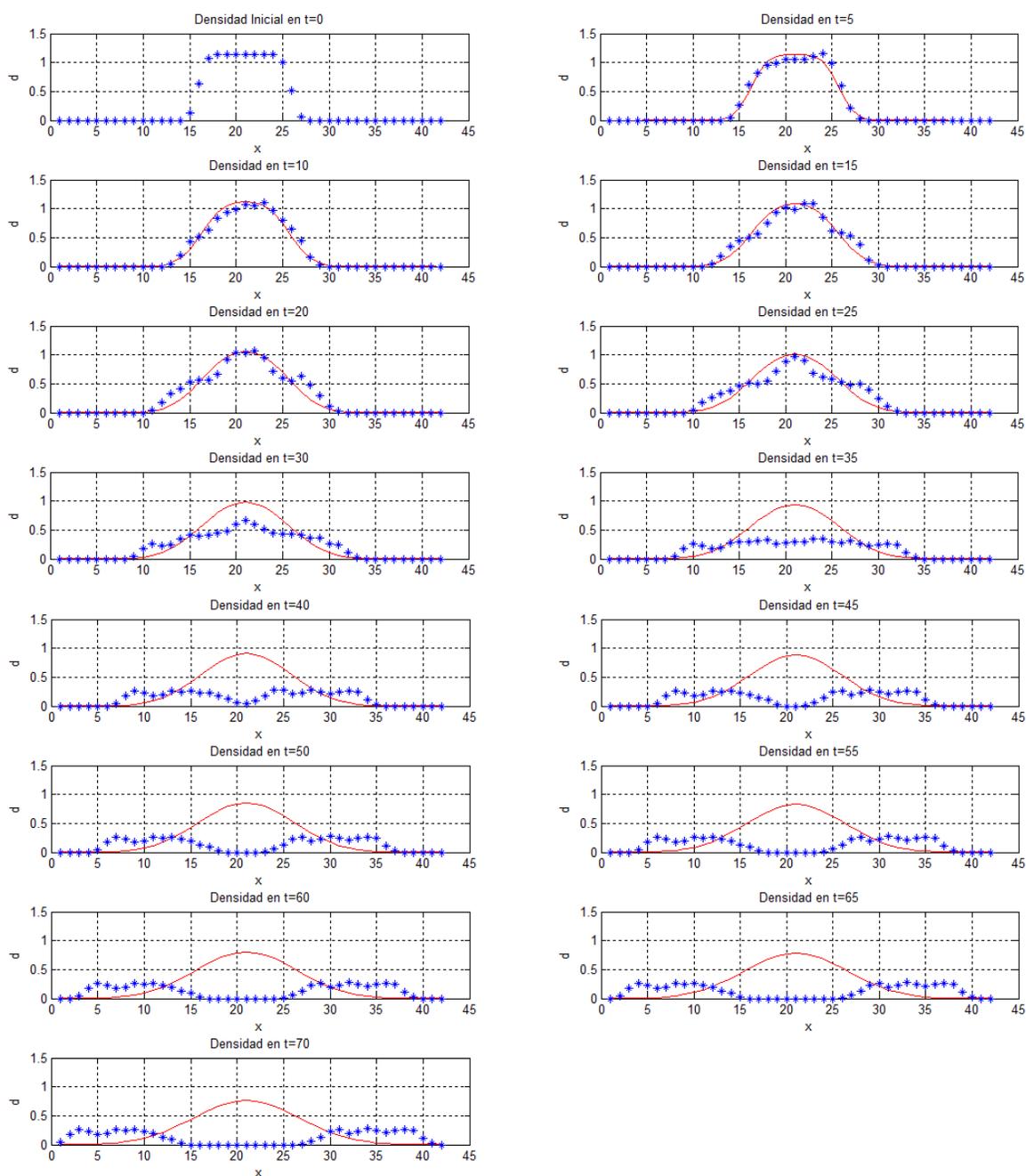


Figura 39. Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 38 y la ecuación 35. La solución numérica está en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica.

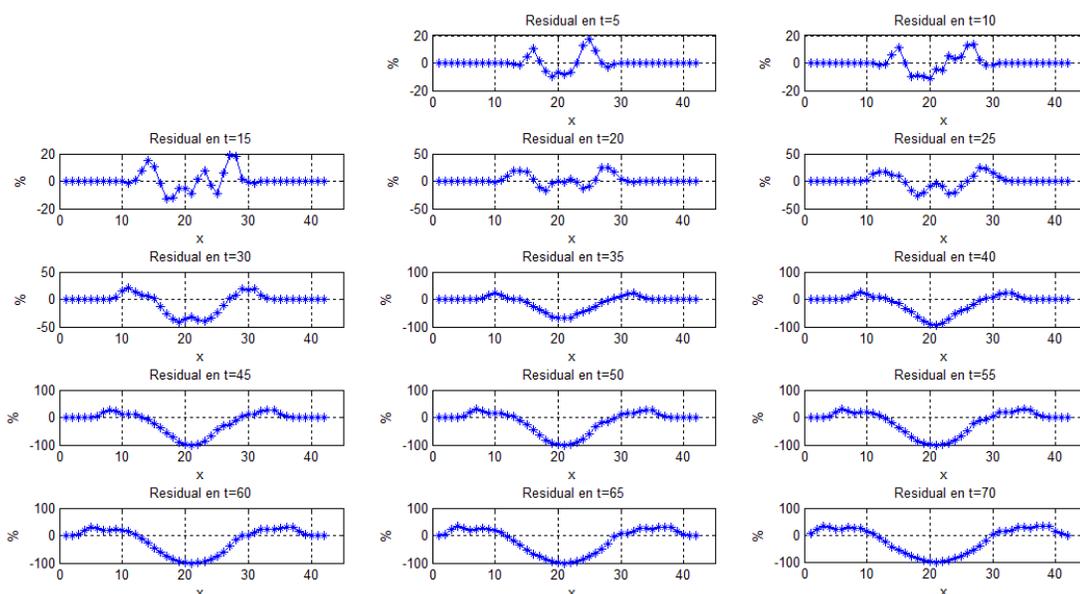


Figura 40. Residuales de la Figura 39. Nótese que los residuales aumentan hasta llegar al 100% indicando que no hay convergencia.

una concentración central en forma de caja. Esto, en principio, deberá sostener el proceso de difusión en tiempos grandes simulados.

El experimento consiste de 2850 partículas centrales rodeadas de 5158 partículas (Figura 41). Inicialmente a las partículas que se encuentran alrededor de la concentración central se les asigna su posición y velocidad de manera aleatoria. Las fronteras son periódicas con topología toroidal. Se utilizó la caracterización de densidad mostrada en la Figura 33 con un radio de promediado de 7 *aristas* y $dx = dy = 5$ *aristas*.

La Figura 41 muestra la evolución de la densidad cada 5 pasos en el tiempo hasta el paso 70 en el tiempo. En el paso 0 en el tiempo podemos observar en el centro de la región la mayor densidad de partículas y alrededor se encuentran partículas diseminadas. En los siguientes pasos hay una dispersión de partículas de manera uniforme y radial hasta el paso 15 en el tiempo. A partir del paso 20 al 30 en el tiempo se forman 4 lóbulos donde se nota una mayor densidad de partículas. Del paso 40 en adelante se

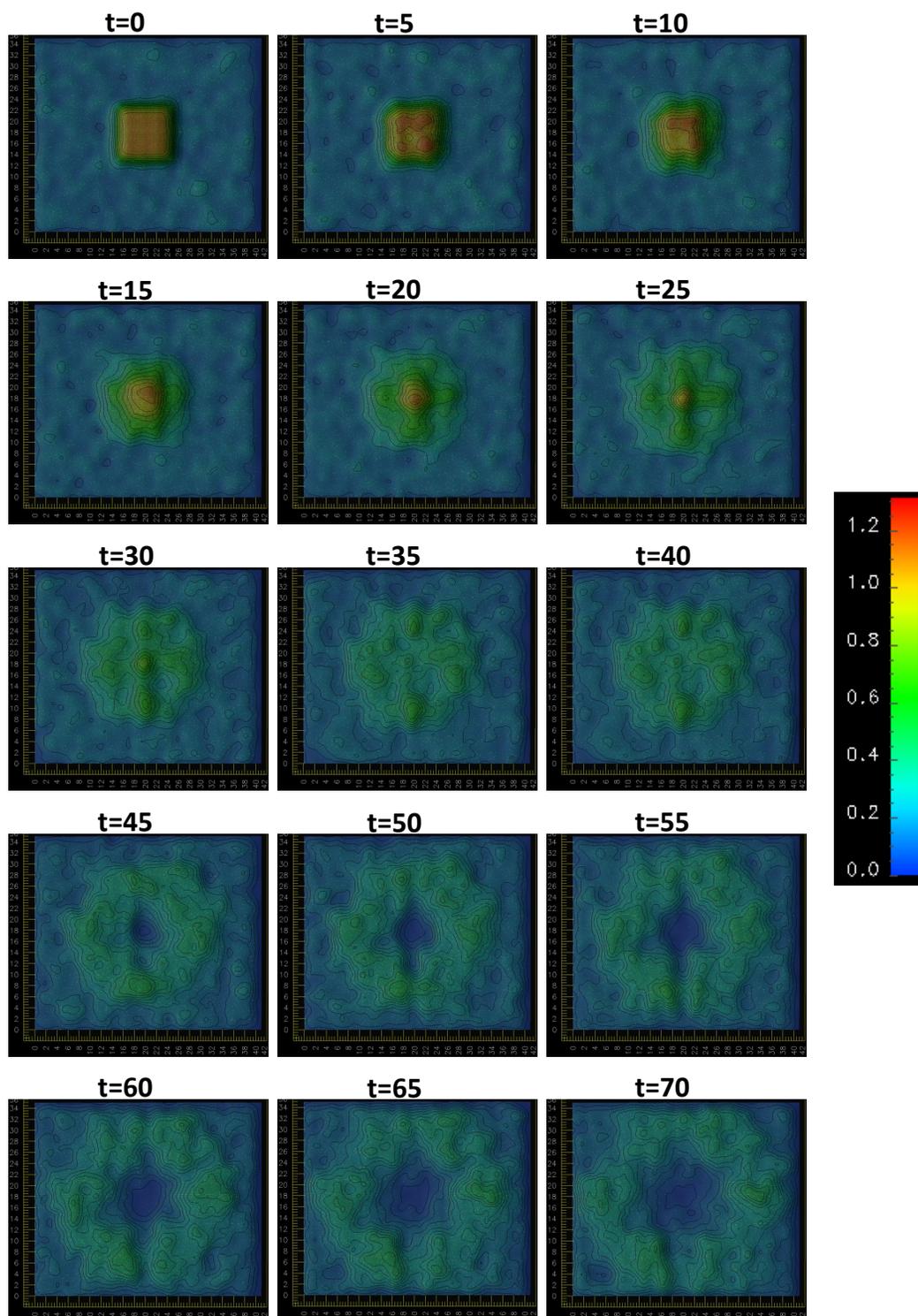


Figura 41. Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas en el centro y alrededor 5158 partículas diseminadas, las fronteras son periódicas con topología toroidal.

empieza a formar un anillo de dispersión con fuerte simetría radial.

Ahora se compara los resultados de este nuevo experimento numérico con la solución analítica del problema continuo dado por la ecuación 35. En la simulación numérica se realiza un corte en $y = 19$ y se toman los valores del intervalo $0 \leq x \leq 42$. La Tabla III muestra los valores asignados en la solución analítica que se sustituyen en la ecuación 35. El valor de D es unicamente para auto difusión (Sukop y Thorne, 2006).

Tabla III. Valores utilizados en la ecuación 35 para el caso de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida.

D	$\frac{1}{6} \approx 0.1666$
C_b	0.1550
C_i	1.1368
$\frac{C_b+C_i}{2}$	0.4909
l	9.5

En la Figura 42 se muestra el análisis de convergencia; la solución analítica esta representada con línea continua roja y la solución numérica esta representada con asteriscos azules. La solución numérica ajusta bien con respecto a la solución analítica hasta el paso 15 en el tiempo. Los residuales para los primeros 10 pasos en el tiempo están alrededor de $\pm 10\%$ y en el paso 15 en el tiempo los residuales llegan a $\pm 20\%$ (Figura 43). A partir del paso 20 en el tiempo hasta el paso 30 en el tiempo se nota la formación de una cresta en la solución numérica. A partir del paso 40 en el tiempo se forman 2 lóbulos moviéndose en direcciones opuestas que corresponden anillo de dispersión. También la solución numérica se difunde más rapido que la solución analítica y los residuales aumentan hasta llegar al 100%.

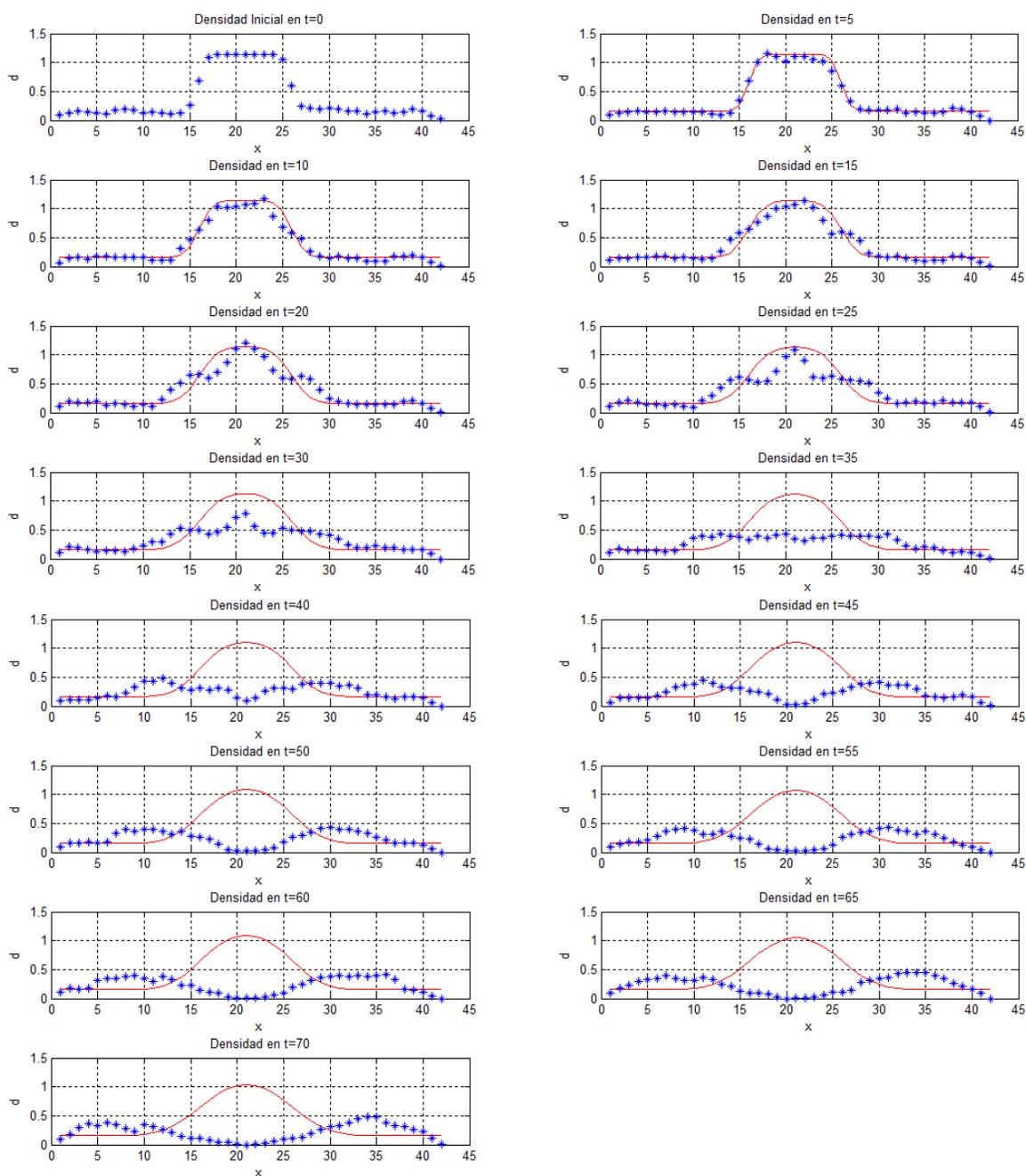


Figura 42. Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 41 y la ecuación 35. La solución numérica esta en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica.

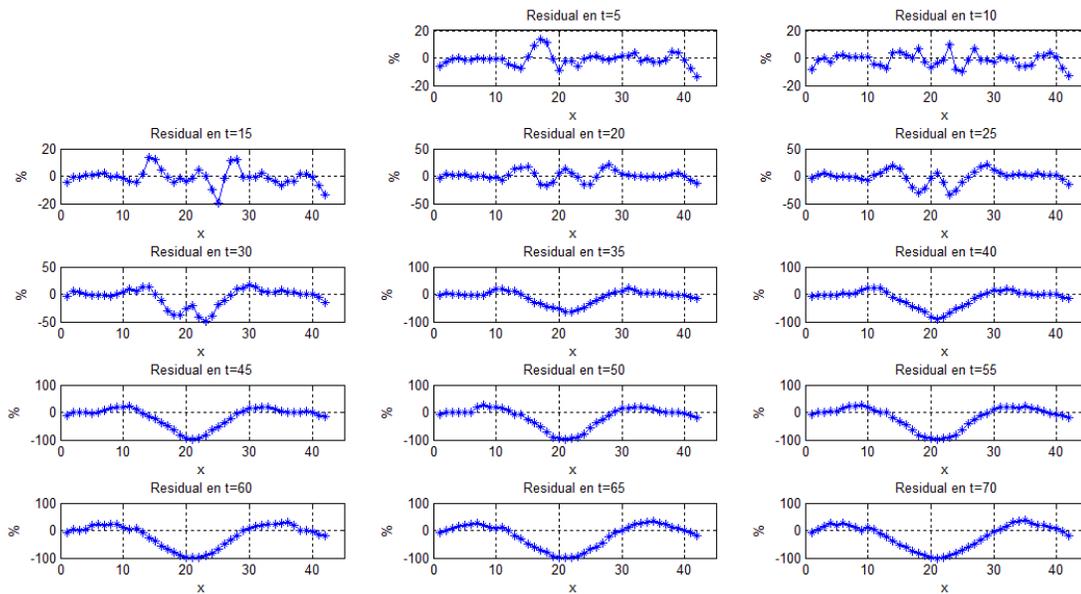


Figura 43. Residuales de la Figura 42. Nótese que los residuales aumentan hasta llegar al 100% indicando que no hay convergencia.

III.3 Solución analítica de una onda difusiva

La Figura 39 y 42 muestran que para tiempos grandes la velocidad de grupo de las partículas es más rápida que la predicha por difusión. Aun más, recordemos que en la Figura 41 aparece un anillo de dispersión que se asemeja a la propagación de una onda. Lo que podemos deducir es que en modelo FHP están presentes dos fenómenos: uno de difusión y otro de propagación de onda. Por lo tanto el análisis de convergencia es incompleto y es necesario incorporar el fenómeno de difusión como el movimiento ondulatorio. La siguiente ecuación describe estos fenómenos:

$$\frac{1}{\tau^2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (37)$$

La ecuación 37 es conocida como la ecuación del telegrafista y tiene la propiedad de capturar procesos ondulatorios y difusivos. La razón $\frac{1}{\tau^2}$ en la ecuación 37 se puede interpretar como el tiempo característico que le lleva establecerse a el flujo macroscopico $q = D\nabla C$ cuando se introduce un cambio instantáneo en la concentración (Figura 44).

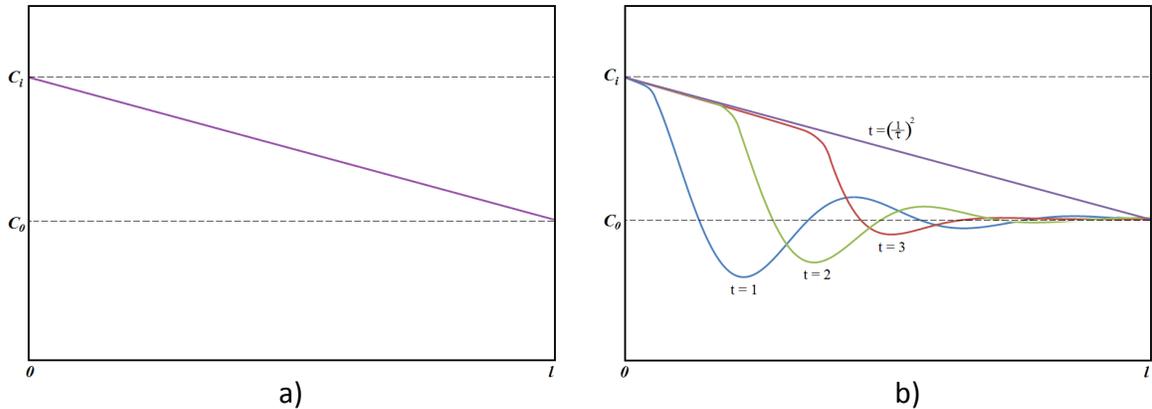


Figura 44. a) La primera ley de Fick establece que aparece un flujo instantáneo sobre la distancia l cuando se introduce un cambio en la concentración. El flujo está dado por $q = D(C_1 - C_0)/l$. b) La ecuación del telegrafista (37) establece que el flujo se establece en el tiempo característico $\frac{1}{\tau^2}$.

En el caso que no hay resistencia con el medio la ecuación (37) se reduce a la ecuación de onda:

$$\frac{1}{\tau^2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (38)$$

Cuando la resistencia en el medio es grande la ecuación 37 se reduce a la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (39)$$

Para el análisis de convergencia es necesario conocer la solución de la ecuación 37 a nuestro problema de valores iniciales y de frontera. Dicha solución, sin embargo, es difícil de calcular ya que involucra funciones de Fresnel y otros términos que solo pueden obtenerse por esquemas numéricos. Aquí se deriva una solución aproximada basada en la solución de la ecuación de difusión (35) y a partir de la solución de D'Alambert a la ecuación de onda en una dimensión. La solución de D'Alambert establece que los cambios en concentración por la propagación de ondas materiales es:

$$C(x, t) = \frac{1}{2} \left[f(x - vt) + f(x + vt) \right] + \frac{1}{2c} \int_{x-vt}^{x+vt} g(\xi) d\xi \quad (40)$$

en donde $f(x)$ es una función cualesquiera que satisface las condiciones iniciales del pulso material inicial. La ecuación 40 nos dice que tendremos ondas propagándose en direcciones opuestas.

Ahora bien, si se truncan la solución de la ecuación del telegrafista a los términos de primer orden se obtendrá la solución aproximada siguiente:

$$C_1(x, t) = ae^{-kt} \left(erf \frac{0.5l - x + vt}{\sqrt{(4Dt)}} + erf \frac{0.5l + x + vt}{\sqrt{(4Dt)}} \right) \quad (41)$$

$$C_2(x, t) = ae^{-kt} \left(erf \frac{0.5l - x - vt}{\sqrt{(4Dt)}} + erf \frac{0.5l + x - vt}{\sqrt{(4Dt)}} \right) \quad (42)$$

En donde las funciones $C_1(x, t)$ y $C_2(x, t)$ juegan un papel similar a la función $f(x)$ en la solución de D'Alambert. Nótese que estas incluyen un término $ae^{-\frac{kt}{b}}$ que nos dice que la amplitud de las ondas difusivas disminuirá conforme estas se propagan y el

tiempo se incrementa. La solución aproximada a la ecuación del telegrafista esta dada por:

$$C_{total}(x, t) = C_b + \frac{C_i - C_b}{2} \left(C_1(x, t) + C_2(x, t) \right) \quad (43)$$

En la Figura 45 muestra el comportamiento de la ecuación 43 donde dos ondas se propagan, una hacia la derecha y otra hacia la izquierda, la amplitud de estas ondas decrece debido a difusión y al el término $ae^{-\frac{kt}{b}}$. Así emerge de manera natural, de la combinación de los dos fenómenos, una onda difusiva (Ortigoza-Capetillo, 2007).

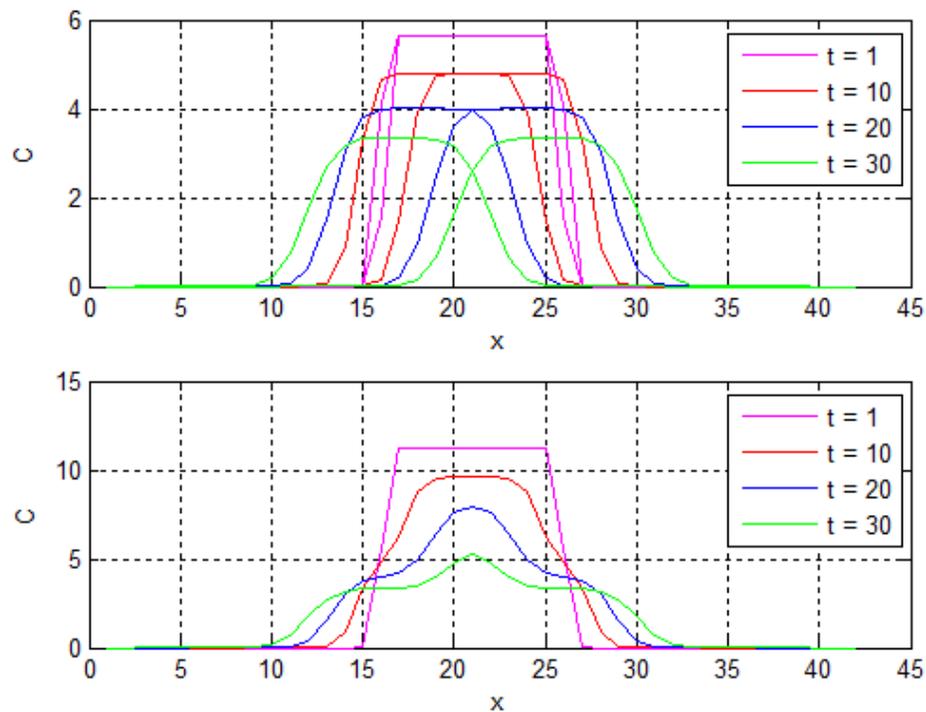


Figura 45. En la gráfica superior se muestra el la propagación de dos ondas (función $C_1(x, t)$ y $C_2(x, t)$ en ecuaciones 41 y 42), una hacia la derecha y otra hacia la izquierda. Cada onda, además, sufre disipación por difusión. En la gráfica inferior se muestra el proceso resultante que emerge de la suma de las ondas C_1 y C_2 .

III.3.1 Simulación numérica de la difusión de una concentración inicial en forma de función caja (onda difusiva)

A continuación se realiza el análisis de convergencia para el ejemplo mostrado en la Figura 38 utilizando ahora la aproximación dada por la ecuación 43. Los valores de la solución numérica se toman a lo largo de un corte en $y = 19$ y el intervalo $0 \leq x \leq 42$. La Tabla IV muestra los valores utilizados en la ecuación del telegrafista para obtener la solución analítica:

Tabla IV. **Valores de los parámetros libres de la solución de la ecuación del telegrafista 43. Nótese que el valor del coeficiente de difusión disminuyen a partir del paso 40 en el tiempo y el valor de velocidad de propagación de onda aumenta.**

	Pasos 1 a 40	Pasos 40 a 70
D	$\frac{1}{40} = 0.025$	$\frac{1}{60} \approx 0.0166$
C_i	1.1368	
$\frac{C_i}{2}$	0.5684	
l	10	
a	0.530	
k	0.009	
v	0.135	0.185

La Figura 46 contrasta el comportamiento de la simulación numérica de la Figura 38 contra la solución analítica dada por la ecuación 43. La solución analítica esta representada con línea continua roja y la solución numérica esta representada con asteriscos azules. En los 70 pasos en el tiempo el ajuste de la solución analítica con respecto a la simulación numérica es buena y los residuales se encuentran en $\pm 50\%$ (Figura 47). En

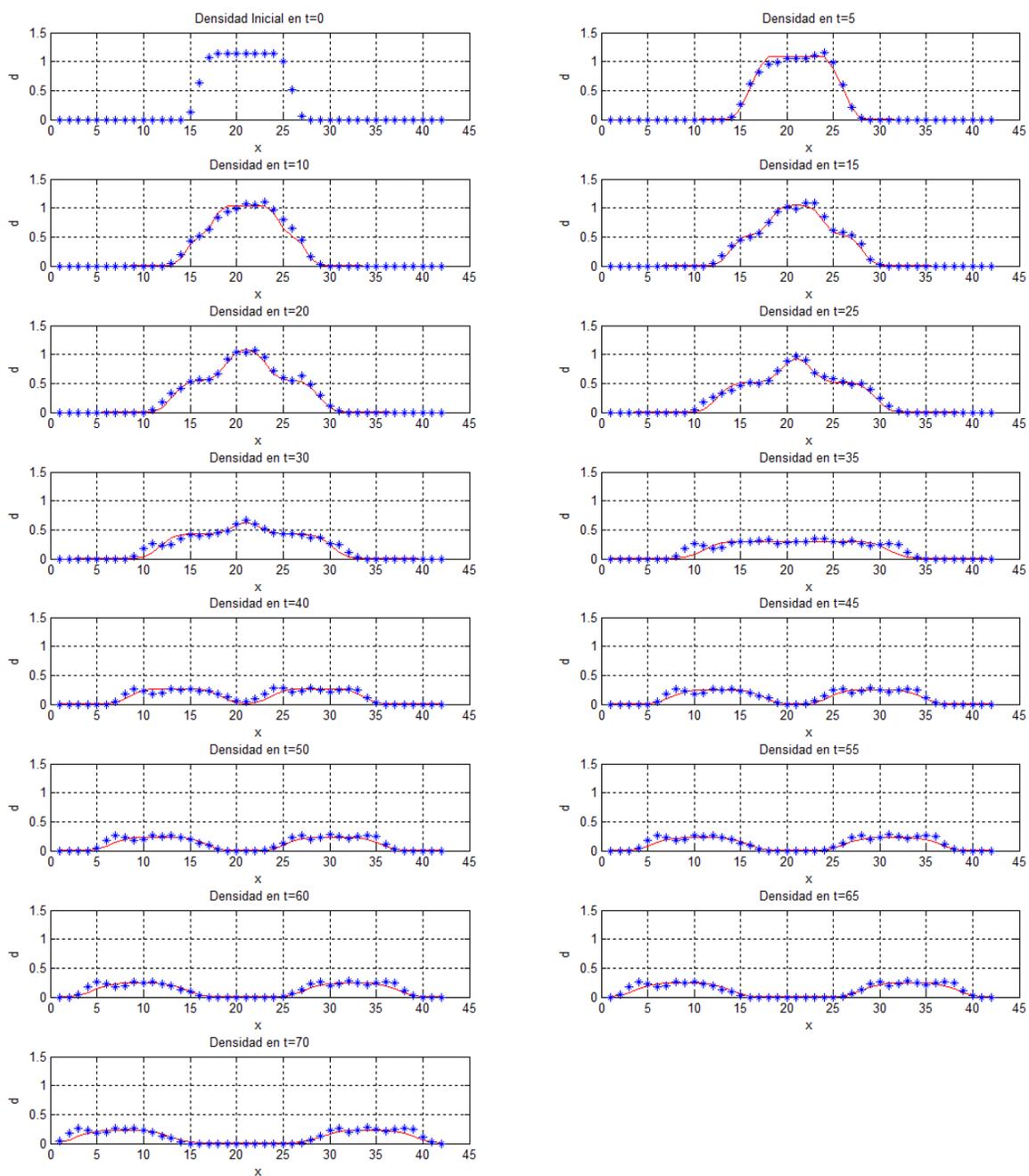


Figura 46. **Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 38 y la ecuación 43. La solución numérica está en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica. En los 70 pasos en el tiempo la solución numérica tiende a la solución analítica.**

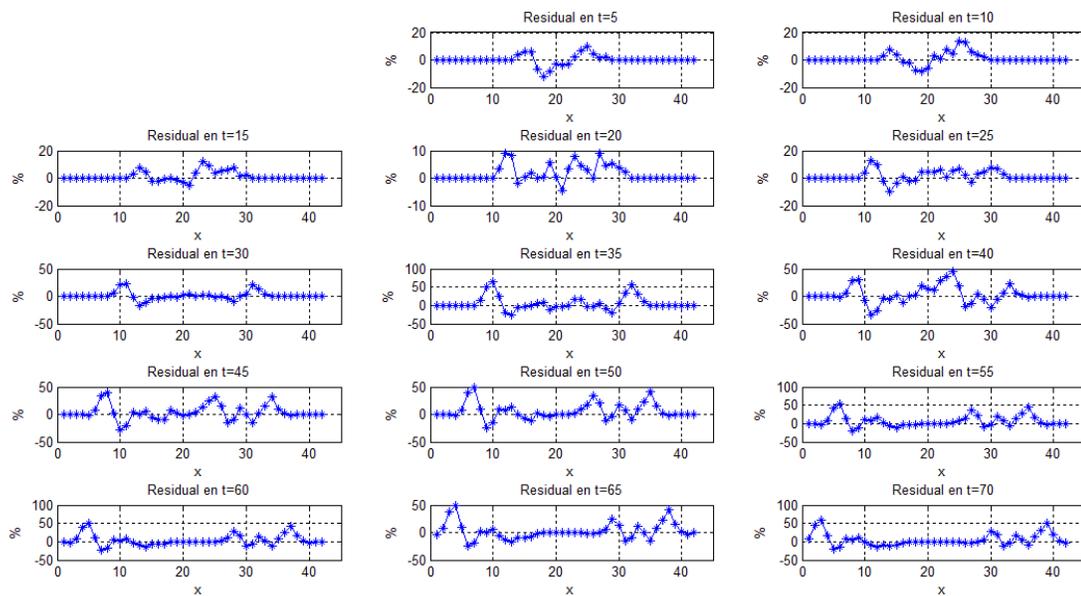


Figura 47. Residuales de la Figura 46.

los primeros 15 pasos en el tiempo es claro que el fenómeno que domina es difusión y los residuales para estos pasos se encuentra alrededor de $\pm 20\%$. Del paso 20 al 40 en el tiempo los fenómenos de propagación de onda y de difusión son igualmente importantes. A partir del paso 40 el fenómeno dominante es la propagación de onda, la velocidad con la que se separan las ondas aumenta y el coeficiente de difusión disminuye lo que indica que la difusión es más lenta como muestra Tabla IV.

III.3.2 Experimento numérico de la dispersión de una concentración inicial en forma de caja en medio de una concentración diluida (onda difusiva)

Ahora se presenta el análisis de convergencia para el ejemplo con partículas alrededor de la concentración inicial central mostrado en la Figura 41 utilizando la solución analítica

aproximada dada por la ecuación 43. Los valores de la solución numérica corresponden a un corte en $y = 19$ y el intervalo $0 \leq x \leq 42$. En esta se utilizan los valores de la Tabla V.

Tabla V. Valores de los parámetros libres utilizados en la solución de la ecuación del telegrafista 43. Nótese que el valor del coeficiente de difusión disminuye a partir del paso 40 en el tiempo y el valor de velocidad de propagación de onda aumenta.

	Pasos 1 a 40	Pasos 40 a 70
D	$\frac{1}{40} = 0.025$	$\frac{1}{60} \approx 0.0166$
C_b	0.1550	
C_i	1.1368	
$\frac{C_b+C_i}{2}$	0.4909	
l	10	
a	0.523	
k	0.009	
v	0.135	0.205

La Figura 48 contrasta la simulación numérica de la Figura 41 contra la solución analítica aproximada dada por la ecuación 43. La solución analítica esta representada con línea continua roja y la solución numérica esta representada con asteriscos azules. La solución numérica tiene un ajuste es bueno con respecto a la solución analítica para los 70 pasos en el tiempo. Los residuales para los 70 pasos en el tiempo encuentran entre ± 50 (Figura 49). En los primeros 15 pasos en el tiempo el fenómeno dominante es difusión y los residuales se están entre ± 20 . A partir del paso 20 en el tiempo se notar la separación de las ondas y hasta el paso 40 en el tiempo se hacen presentes los

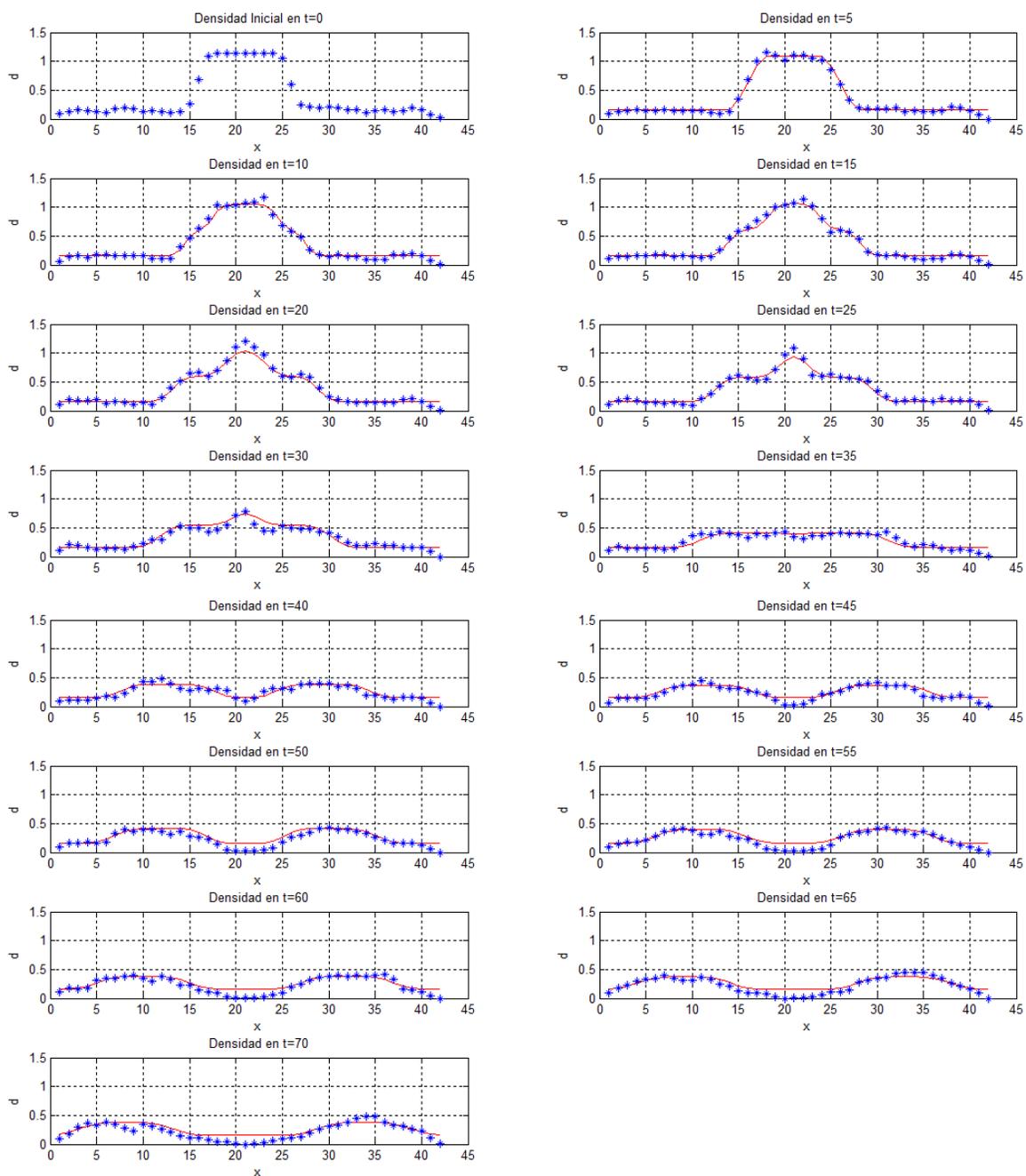


Figura 48. **Análisis de convergencia de la simulación numérica mostrada en la Figura 41 y la ecuación 43. La solución numérica está en línea continua roja y en asteriscos azules la solución numérica. La solución numérica tiende a la solución analítica en los 70 pasos en el tiempo.**

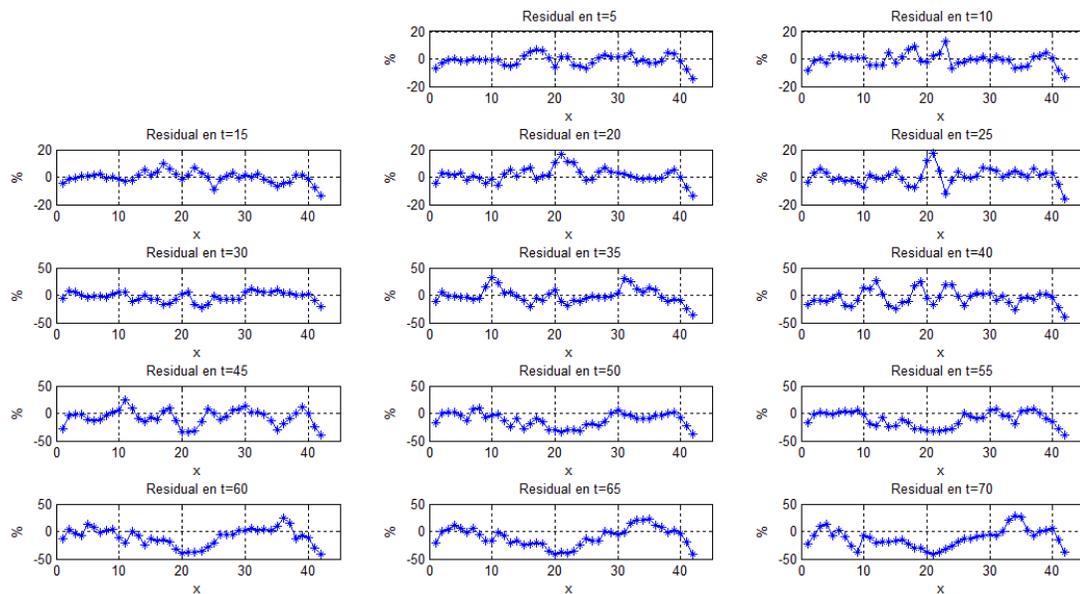


Figura 49. Residuales de la Figura 48.

fenómenos de propagación de onda y difusión en la misma proporción. En el paso 40 predomina el fenómeno de propagación de onda sobre el proceso difusivo, la velocidad con la que se separan las ondas aumenta y el coeficiente de difusión disminuye como muestra Tabla V.

III.4 Simulación de la dispersión de partículas a través de un medio poroso

Como se mencionó en el capítulo II el modelo tienen la capacidad de simular el flujo de partículas a través de un medio poroso. A continuación se presentan tres experimentos numéricos con diferentes porosidades para conocer el comportamiento de la distribución de densidad de partículas en tales tipos de medios.

El primer ejemplo consta de 2850 partículas colocadas en el centro de la región en un

área rectangular de 50 por 57 nodos. La velocidad de cada partícula es asignada aleatoriamente, las fronteras son periódicas con topología toroidal. En el primer experimento el sólido ocupa el 5% del espacio y se encuentra distribuido aleatoriamente alrededor de la concentración central. La distribución de densidad esta calculada con un radio de promediado de 7 unidades y $dx = dy = 5$ unidades. La Figura 50 muestra imagenes de la simulación numérica cada 10 pasos en el tiempo hasta el paso 110.

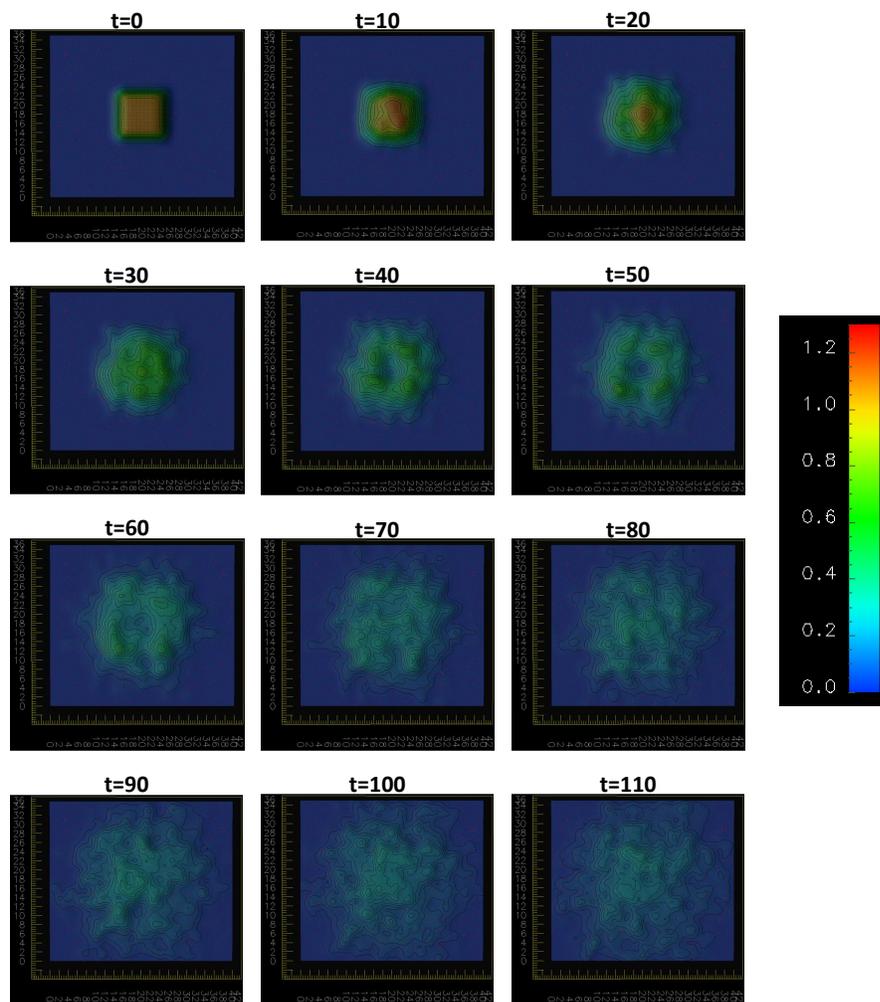


Figura 50. Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 5% de sólido colocado aleatoriamente alrededor de la concentración central.

En el paso 0 en el tiempo se muestra la concentración inicial en el centro de la región, del paso 10 al 30 hay dispersión de partículas en el medio poroso. Del paso 40 al 60 en el tiempo se forma un anillo de dispersión. A partir del paso 70 en el tiempo el anillo pierde coherencia y domina la dispersión en el medio poroso.

En la Figura 51 se muestran gráficas a lo largo de un corte en $y = 19$ en el intervalo $0 \leq x \leq 42$ de las imágenes mostradas en la Figura 50. Se observan tres fenómenos en el experimento: difusión, propagación de onda y difusión entre poros.

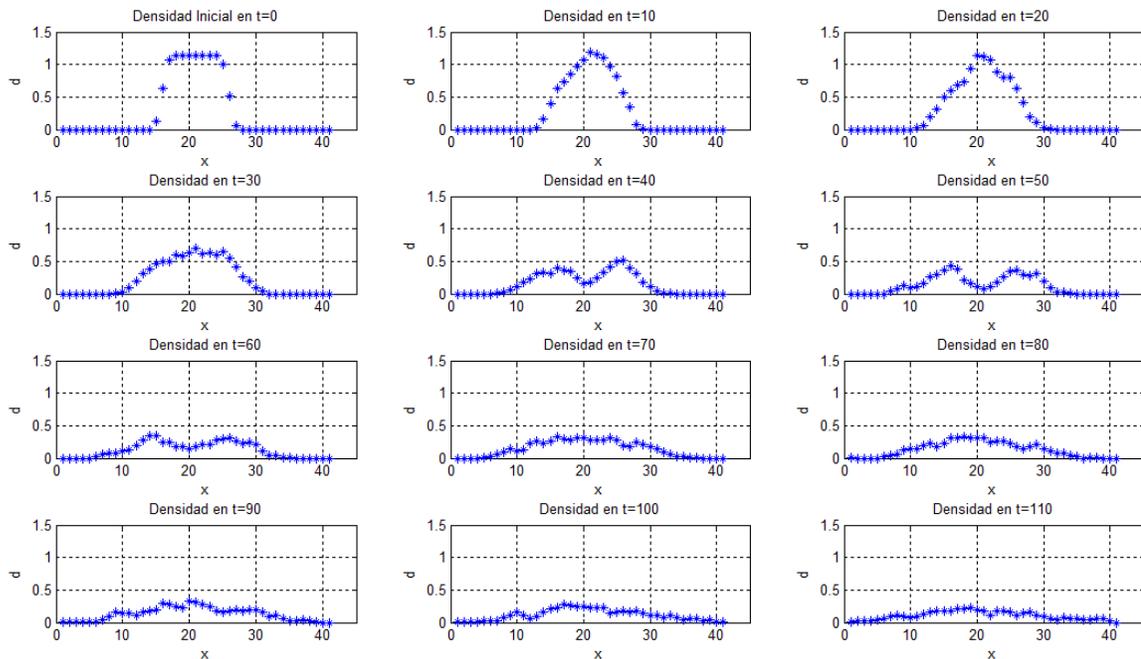


Figura 51. **Evolución de la simulación numérica con 5% de sólido. Nótese que en los primeros pasos donima difusión, en los pasos intermedios hay propagación de ondas y al final difusión entre los poros.**

El segundo ejemplo consta de 2850 partículas colocadas en el centro de la región en donde su la velocidad es asignada aleatoriamente y las fronteras son periódicas con topología toroidal. El sólido ocupa 20% del espacio y tiene una estructura aleatoria dispuesta alrededor de la concentración central. La Figura 52 muestra la evolución de

la densidad cada 10 pasos en el tiempo hasta el paso 110. En el paso 0 en el tiempo se muestra la concentración inicial en el centro de la región, en el paso 10 y 20 en el tiempo hay dispersión de partículas de manera uniforme. Del paso 30 al 50 en el tiempo se forma un anillo de de dispersión y del paso 60 en el tiempo en adelante hay un régimen dinámico en la región central. En el medio poroso, por otra parte, las partículas se dispersan formando una estructura irregular.

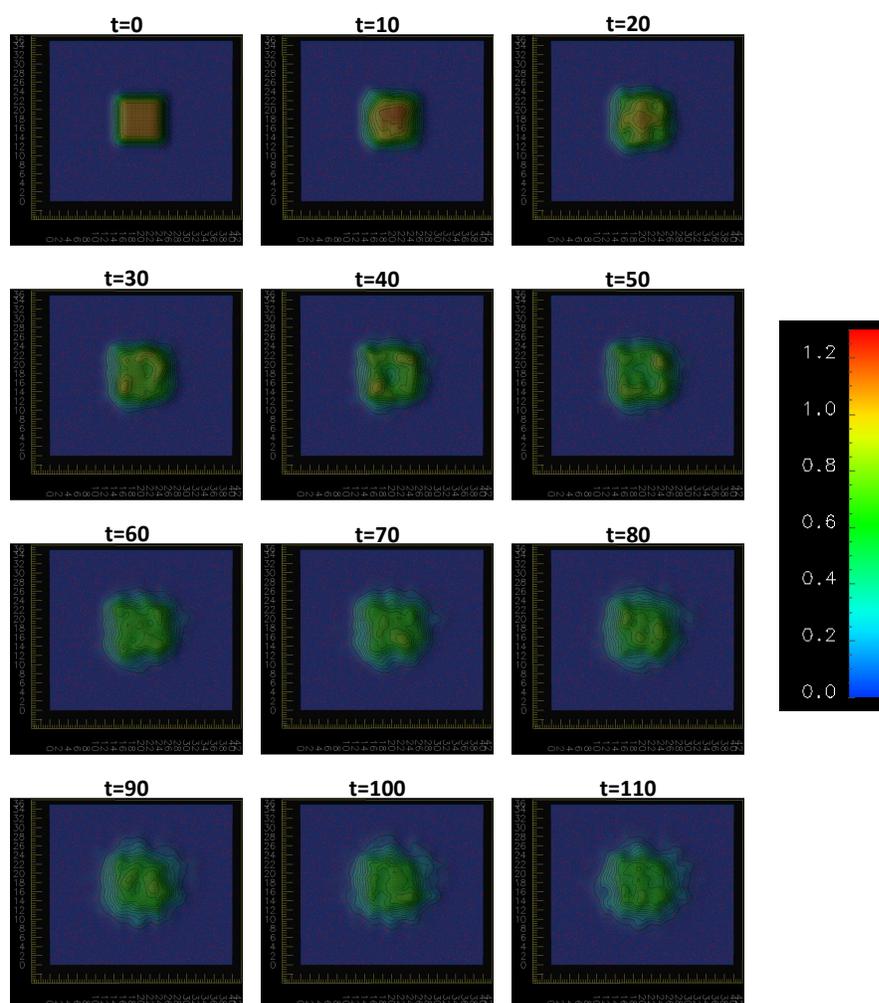


Figura 52. Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 20% de sólido diseminado alrededor de la concentración central.

La Figura 53 muestra cortes del experimento numérico presentado en la Figura 52. Los cortes fueron tomados en $y = 19$ en el intervalo $0 \leq x \leq 42$. Se puede apreciar en los cortes que del paso 10 al 20 en el tiempo el comportamiento es difusivo y del paso 30 en el tiempo en adelante el comportamiento es dinámico con difusión de partículas hacia el medio poroso (i.e., la solución no tiene un estado estacionario o cuasi estacionario).

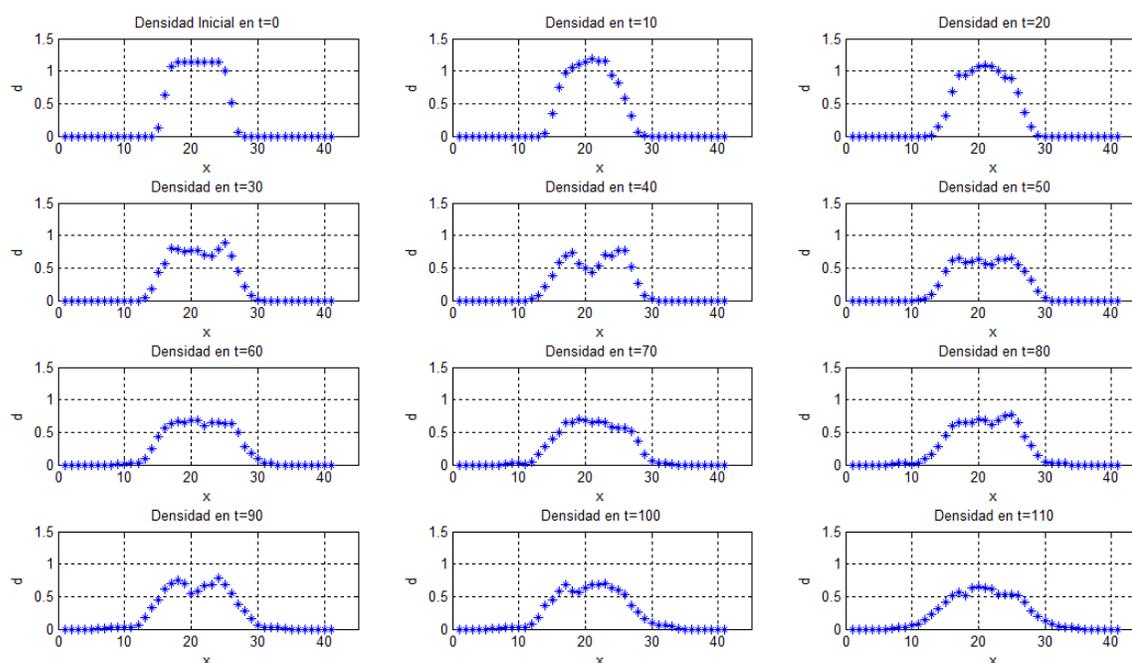


Figura 53. **Evolución de la simulación numérica con 20% de sólido. El comportamiento en los primeros pasos es de difusión, en los pasos intermedios hay propagación de ondas y al final difusión entre los poros. Nótese como la distribución de densidad no tiene un estado estacionario y que esta oscilando como un cuerda sujeta en sus extremos.**

En el tercer ejemplo consta de 2850 partículas colocada en el centro de la región donde su la velocidad es asignada aleatoriamente y las fronteras son periódicas con topología toroidal. El sólido ocupa 40% del espacio y se encuentra diseminado alrededor de la concentración central. La Figura 54 muestra el comportamiento de la simulación

numérica cada 10 pasos en el tiempo hasta el paso 110. En todos los pasos en el tiempo hay un régimen dinámico en la región central con dispersión lenta entre los poros.

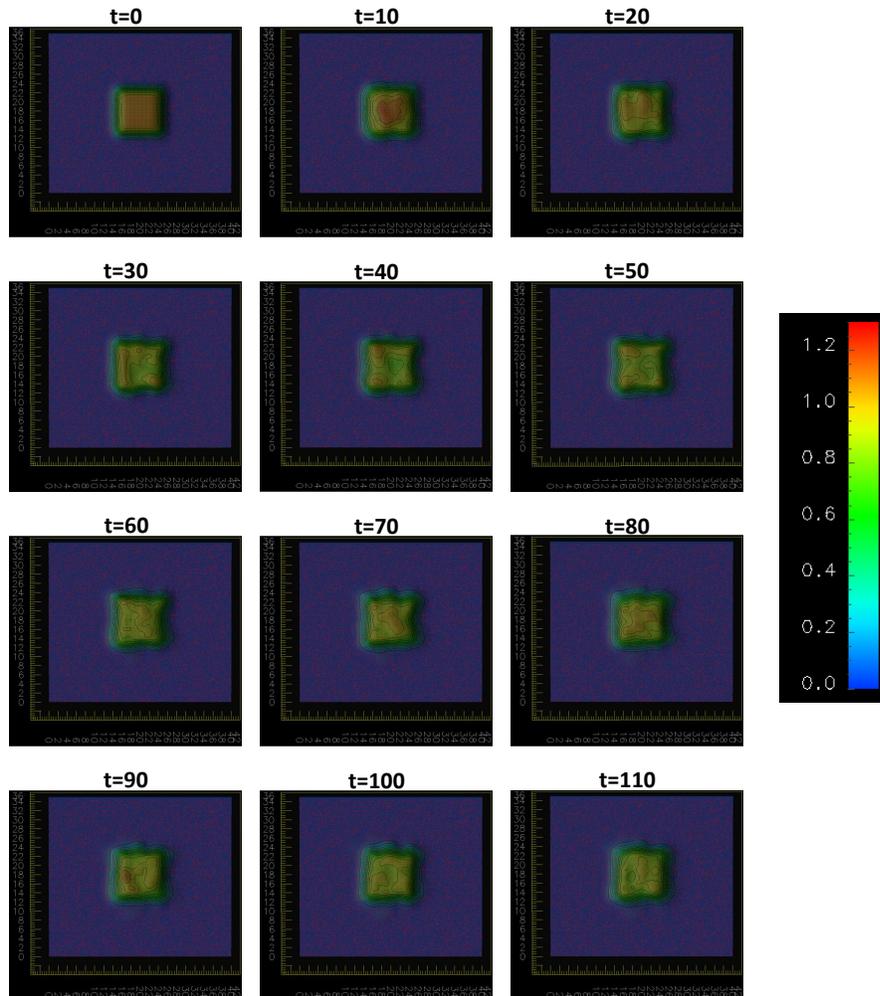


Figura 54. Evolución de la simulación numérica con 2850 partículas colocadas en el centro de la región, con 40% de sólido colocado aleatoriamente alrededor de la concentración central.

En la Figura 55 me muestran gráficas a lo largo de cortes en $y = 19$ en el intervalo $0 \leq x \leq 42$ de las imágenes mostradas en la Figura 54. En los cortes se notan fuertes oscilaciones en la densidad de partículas en la parte central del modelo. Estas son

similares a de los modos fundamentales de vibración de una membrana cuadrada. Al aumentar la cantidad de sólido disminuye el espacio disponible para la circulación de las partículas. Así se produce un régimen dinámico vibracional con difusión lenta entre el espacio poroso.

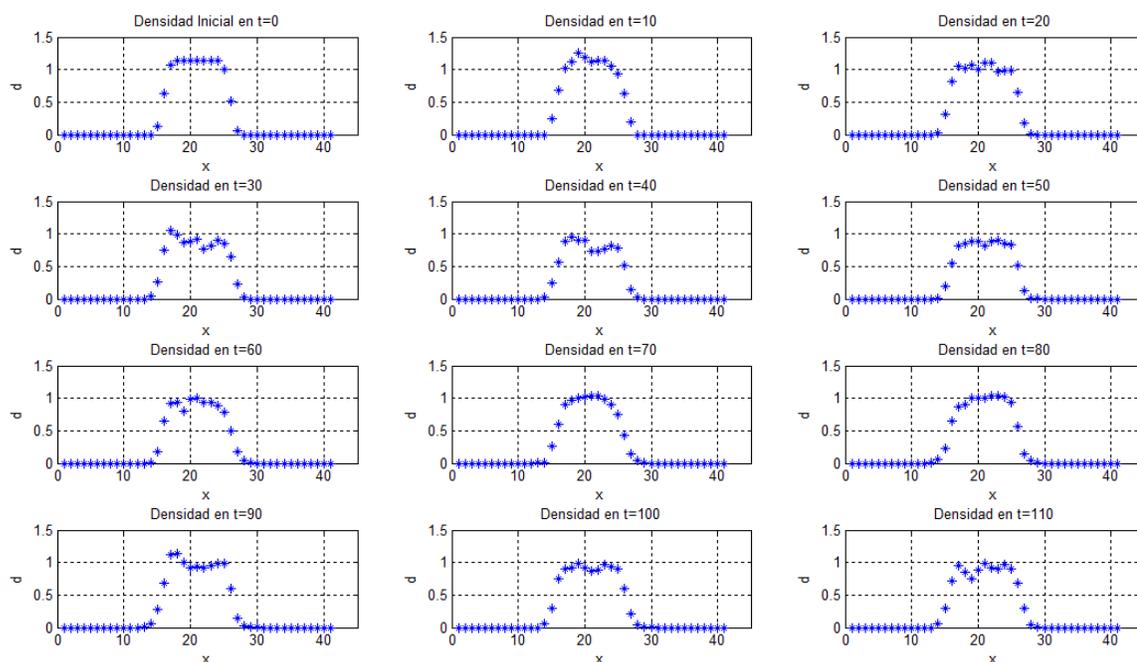


Figura 55. **Evolución de la simulación numérica con 40% de sólido. El comportamiento en todos los pasos es dinámico con difusión lenta entre los poros.**

Capítulo IV

ACUÍFERO DE SANTIAGO TIANGUISTENCO COMO ESTUDIO DE CASO

Salas-García *et al.* (2011) realizaron un estudio en el Valle de Toluca con el objetivo de estimar el tiempo que tardan aguas residuales en atravesar la zona no saturada. Esta tiene una estructura muy compleja ya que consta de intercalaciones de suelos granulares y rocas volcánicas fracturadas. El caso es ideal para probar el modelo ya que este puede incorporar de manera natural tales cambios de estructura en el medio poroso. Como se verá, en otros modelos aplicados al acuífero no incorporaron estos efectos fundamentales, lo que resulta en sobre estimaciones del tiempo de infiltración de aguas residuales. El problema es de interés ya que esas aguas eventualmente son incorporadas al acuífero de Santiago Tianguistenco.

IV.1 Modelización del flujo

Salas-García *et al.* (2011) aplicaron el modelo UNSAT desarrollado por el USGS que simula el flujo y el transporte de contaminantes en la zona vadosa. Los autores en su modelo consideraron a la zona vadosa como un conjunto de múltiples horizontes equivalentes a medios porosos continuos.

Los autores recurrieron al uso del modelo UNSAT ya que la ley de Darcy no describe adecuadamente el flujo de agua en la zona no saturada. Esto se debe, por un lado, al rápido decrecimiento del valor de la conductividad hidráulica cuando el contenido de

agua disminuye y, por otro, a la disminución del área transversal disponible para el flujo de agua en medios no saturados. El modelo está basado en la ecuación de Richards (Richards, 1931), la cual expresa la conductividad hidráulica, K , como una función del contenido de humedad, θ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (44)$$

donde $D(\theta)$ representa la difusividad del agua y z es la profundidad. La función $K(\theta)$ se le conoce como la curva de retención de agua la cual se puede representar como el producto $K(\theta) = K_s k_r(\theta)$ donde K_s es la conductividad hidráulica saturada del medio y $k_r(\theta)$ es la conductividad hidráulica relativa. La función k_r guarda una relación de ley de potencia con θ :

$$k_r(\theta) = \theta^\alpha, \quad (45)$$

los detalles de esta relación pueden ser consultados en Caputo y Stepanyants (2008). La forma general de la ecuación 44 corresponde con la ecuación de Fokker-Planck. La ecuación modela la propagación de un frente de humedad en un medio poroso como un proceso difusivo anómalo.

IV.2 Caracterización de la zona de estudio y modelo conceptual

En enero de 2006 se perforó un pozo de monitoreo con una profundidad de 80.3 m con el fin de hacer un seguimiento temporal del nivel freático local y determinar la columna estratigráfica a partir de los testigos extraídos a cada metro de profundidad (Figura 56). La estratigrafía del terreno se dividió en cinco capas. La primera capa está constituida por arena con una porosidad intergranular del 22% y una conductividad hidráulica de $10^{-4} \frac{m}{s}$ (ver Figura 58 y Tabla VI). La segunda es una capa limo-arcillosa con una porosidad intergranular del 19% y una conductividad hidráulica de $10^{-5} \frac{m}{s}$. La tercera capa es una unidad de basaltos porosidad secundaria por fracturamiento del 28% y una conductividad hidráulica de $10^{-3} \frac{m}{s}$. La cuarta capa consiste de arenas con una porosidad intergranular del 22% y una conductividad hidráulica de $10^{-4} \frac{m}{s}$. La última capa es basáltica con porosidad secundaria por fracturamiento del 28% y una conductividad hidráulica de $10^{-3} \frac{m}{s}$.

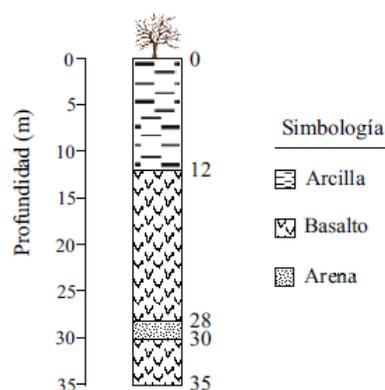


Figura 56. Columna estratigráfica cortada por un pozo de monitoreo perforado en el Valle de Toluca. Tomado de Salas-García et al. (2011).

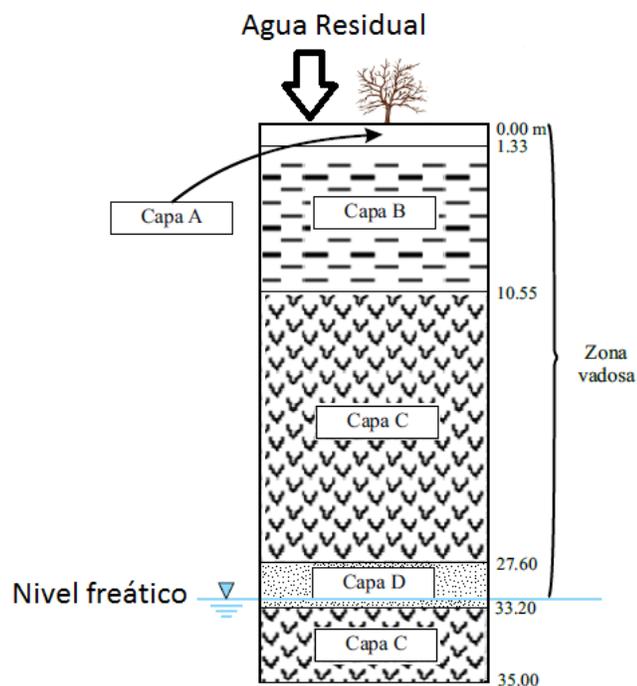


Figura 57. Modelo conceptual de la zona de estudio. Las propiedades materiales de las diferentes capas del modelo se muestran en la Tabla VI.

Tabla VI. Valores de la porosidad eficaz y la conductividad hidráulica para las diferentes capas de la zona vadosa del acuífero del Valle de Toluca. Tomados de Salas-García et al. (2011).

Medio	Medio Equivalente	ϕ_e (%)	$K(\frac{m}{s})$
Capa A	Arena	22	10^{-4}
Capa B	Limo-Arcilloso	19	10^{-5}
Capa C	Basalto permeable	28	10^{-3}
Capa D	Arena	22	10^{-4}
Capa C	Basalto permeable	28	10^{-5}

IV.3 Resultados de la simulación de Salas-García *et al.* (2011)

La Figura 58 muestra los resultados de la simulación de Salas-García *et al.* (2011) utilizando el modelo UNSAT. Como condiciones de frontera Salas-García *et al.* (2011) consideraron un flujo constante vertical y una saturación constante C_0 de contaminante en la parte superior de la región modelada. En la Figura 58 se aprecia la dispersión del frente de contaminante cuya forma esta controlados por los cambios de porosidad y conductividad hidráulica. Nótese que la gráfica esta normalizada con la concentración inicial C_0 . Las capas más superficiales muestran las mayores cantidades de contaminantes y esta se reduce gradualmente con la profundidad. Esta es una característica de procesos de dominados por difusión. Un resultado importante de la modelización de Salas-García *et al.* (2011) es que a las aguas residuales les toma tres años en alcanzar el nivel freático.

IV.4 Aplicación del modelo FHP al acuífero del Valle de Toluca

Basado en la conceptualización (Figura 58) y resultados de Salas-García *et al.* (2011) se procedió a aplicar el modelo FHP en el acuífero de Santiago Tianguistenco. La Figura 59a muestra las cinco capas en que se dividió el terreno con los valores de porosidad efectiva de la Tabla VI. La Figura 59b muestra la densidad de sólido; nótese que las dos primeras capas tienen una estructura vugular con concentraciones en la matriz sólida que forman obstáculos naturales. La tercera y quinta capa tienen una estructura

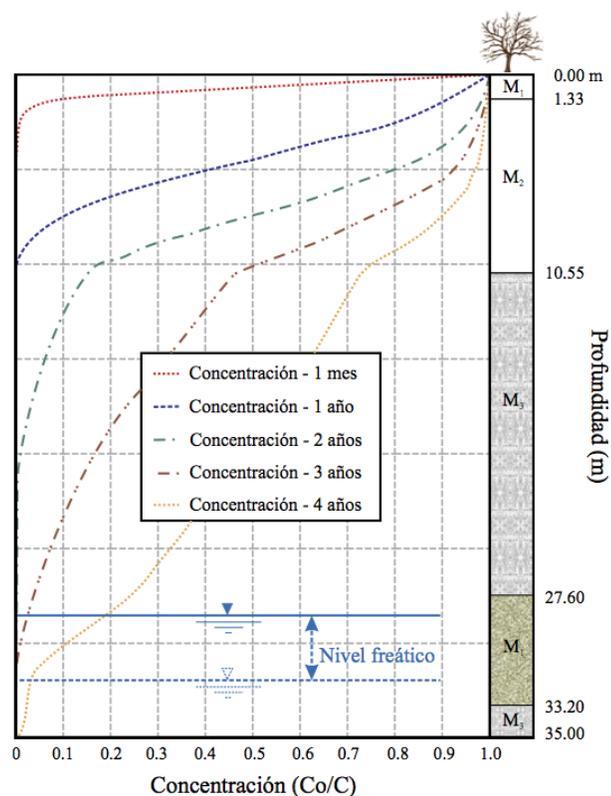


Figura 58. Simulación de transporte y su perfil estratigráfico asociado, donde se indica cómo el contaminante alcanza el nivel freático en tres años.

fracturada. Las fracturas se modelaron por medio de canales en el sólido. La cuarta capa tiene una estructura vugular como las dos primeras capas de acuerdo con las observaciones de Salas-García *et al.* (2011).

La simulación numérica tiene las siguientes características:

1. La región consta de 500 renglones y 10 columnas y la estructura porosa se muestra en la Figura 59. Los primeros dos renglones se utilizaron para imponer un flujo vertical constante de partículas.
2. Las fronteras laterales son periódicas con topología cilíndrica.

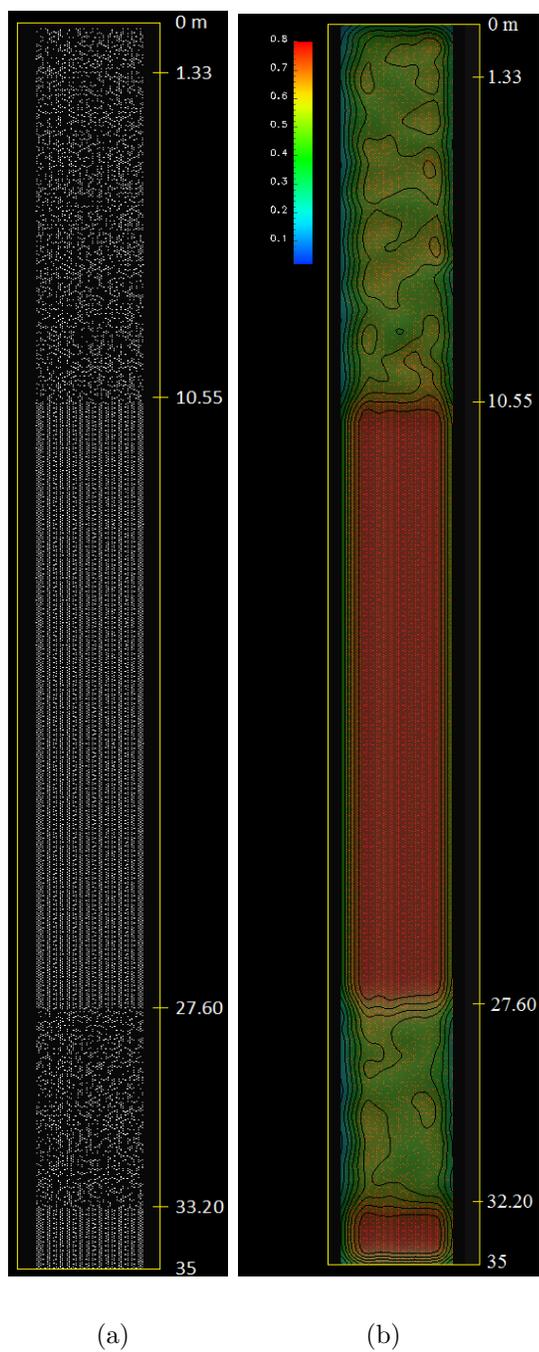


Figura 59. *a)* Representación del modelo conceptual de la zona de estudio con los valores de porosidad eficaz mostrados en la Tabla VI. *b)* Densidad de sólido, la mayor concentración de sólido se encuentra en la región que simula el basalto fracturado y en otras capas se forman vugulos que a la vez generan obstáculos para el paso de partículas.

3. La frontera inferior esta abierta, es decir, las partículas pueden escapar a través de la estructura fracturada de la ultima capa.
4. La caracterización de densidad se calcula con un radio de promediado de 7 unidades y $dx = dy = 5$ unidades.

La Figura 60 muestra la evolución de la simulación numérica en la primeros 3500 pasos de tiempo simulado. En la Figura 60a se observa que en el paso 500 en el tiempo simulado las partículas han atravesado la mitad de la primera capa. En el paso 1500 el frente de partículas atravesó por completo la primera capa (Figura 60b). En los pasos 2500 y 3500 el frente de partículas es más lento por la disminución de la porosidad efectiva de la segunda capa (Figura 60 c y d). Nótese que en las cuatro imágenes de la Figura 60 la densidad de partículas forma un lóbulo en la parte izquierda de la región simulada aprovechando variaciones en la estructura porosa que dan lugar a regiones locales de alta permeabilidad.

El resultado anterior muestra que la solución del modelo FHP contiene fuertes efectos dinámicos. Es decir, el proceso de infiltración no sigue un frente de propagación suave. Este se ilustra en la Figura 61, la cual es una serie de cortes a través del lóbulo discutido anteriormente. Los cortes en densidad muestran que es suave inicialmente. Sin embargo cuando el flujo de partículas comienza a atravesar la segunda capa, el cambio de porosidad frena el avance, formando el lóbulo. Hacia el paso 3500 de tiempo simulado se puede apreciar que el lóbulo se comienza a desprender de la interface entre dos capas.

La Figura 62 muestra la evolución del paso 30000 al 120000 de tiempo simulado. En el paso 30000 el frente de partículas se encuentra a la mitad de la segunda capa. Esto indica que el avance del frente de partículas es diez veces más lento que la segunda

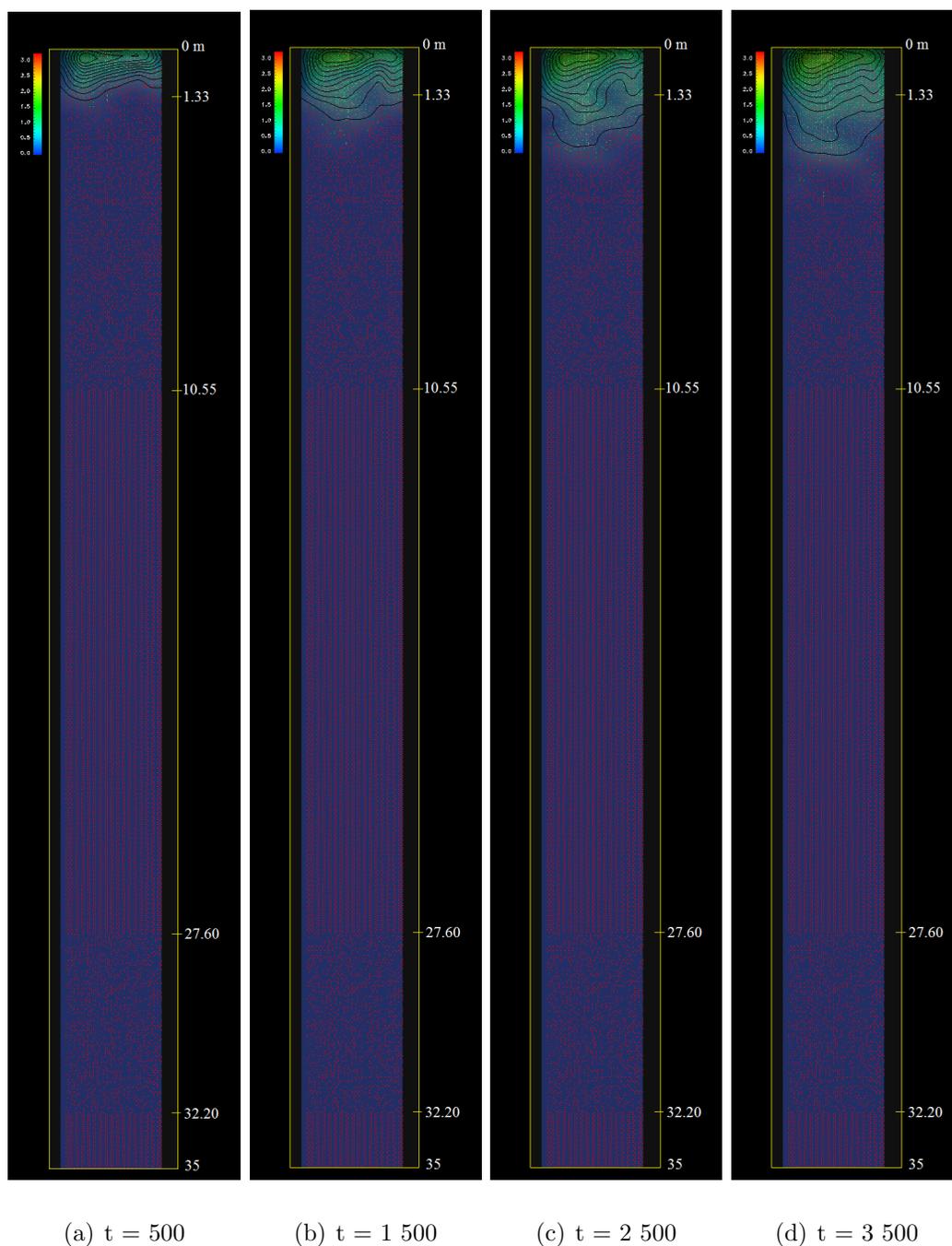


Figura 60. **Evolución de la simulación numérica hasta el paso 3500 en el tiempo. En el paso 500 en el tiempo las partículas han atravesado la mitad de la primera capa. En el paso 1500 el frente de partículas atravesó por completo la primera capa. En los pasos 2500 y 3500 el frente de partículas es más lento por la disminución de la porosidad efectiva de la segunda capa.**

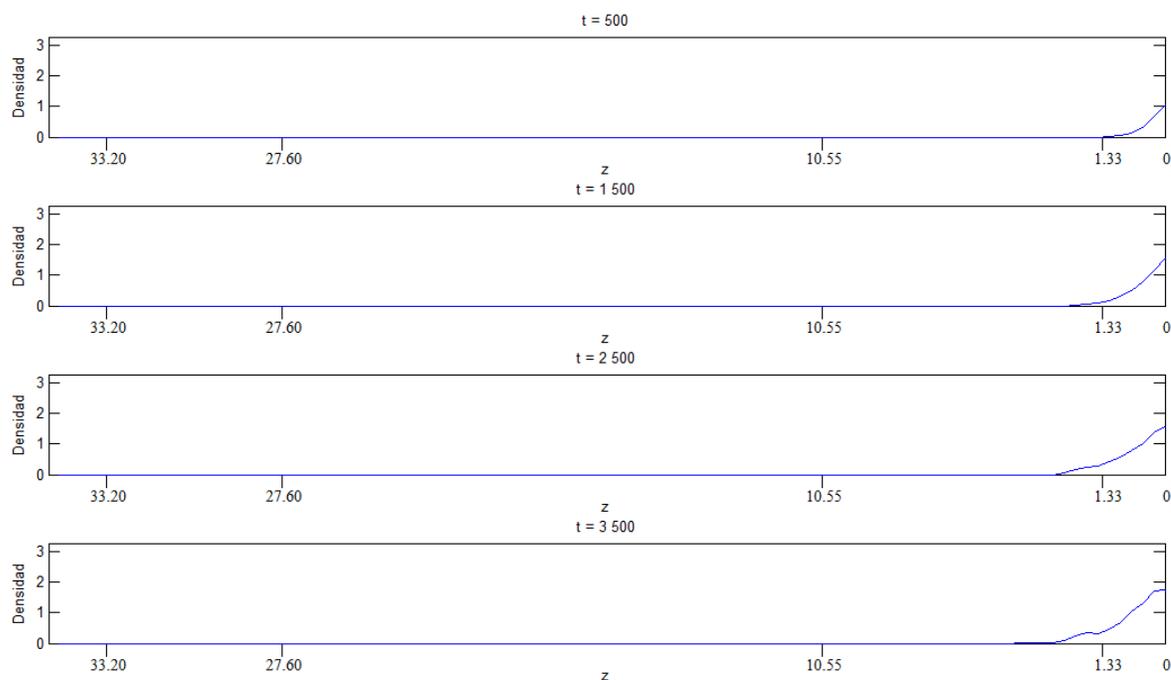


Figura 61. Gráficas de densidad hasta el paso 3500 en el tiempo. Del paso 500 al 2500 la pendiente es suave y en el paso 3500 la pendiente tiene un salto abrupto.

capa con respecto a la primera. Además esto demuestra lo sensible que es el modelo a cambios de porosidad: un cambio del 3% disminuye en un orden de magnitud la razón de avance. A partir del paso 60000 en el tiempo simulado las partículas comienzan a canalizarse a través de las fracturas. Hacia el paso 90000 la canalización es significativa y hacia el paso 120000 las partículas comienzan a invadir la cuarta capa.

La Figura 63 muestra una serie de cortes de la distribución de densidades de las gráficas mostradas en la Figura 62. Los cortes pasan por la parte izquierda de la columna litológica simulada. Puede apreciarse que en la solución numérica la percolación de las partículas se lleva a cabo en dos escalas espaciales: una escala macroscópica suave fuertemente lineal y una escala más pequeña en donde el flujo está influenciado por los vugulos formados por el sólido y los cambios de porosidad entre capas. Estos impiden

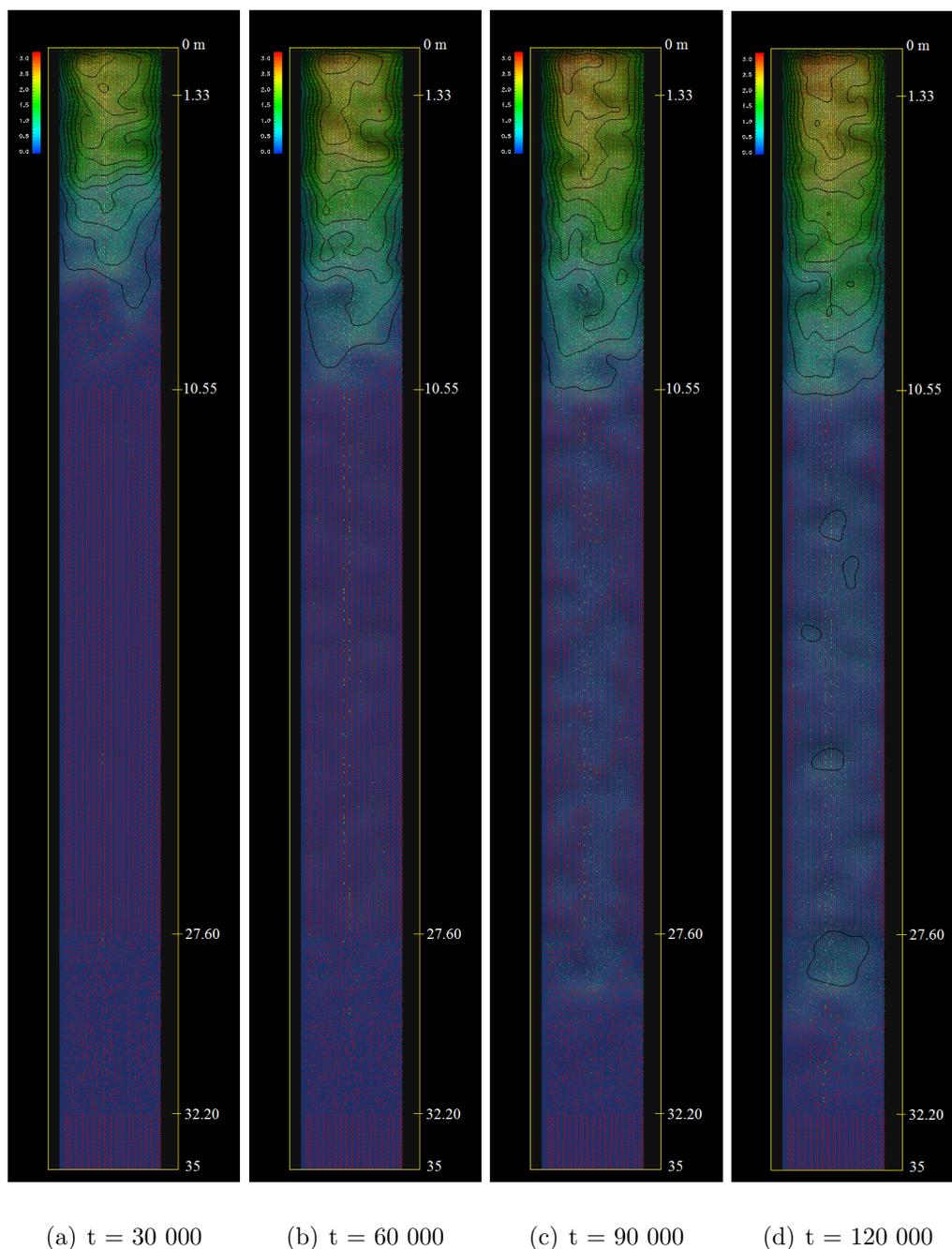


Figura 62. Evolución de la simulación numérica cada 30000 pasos hasta el paso 120000. En el paso 30000 el frente de partículas atravesó la mitad de la segunda capa. A partir del paso 60000 en el tiempo algunas partículas empiezan a canalizarse a través de las fracturas. En el paso 90000 el frente de partículas atravesó por completo la segunda capa. En el paso 120000 en el tiempo el frente de partículas llegó a la cuarta capa.

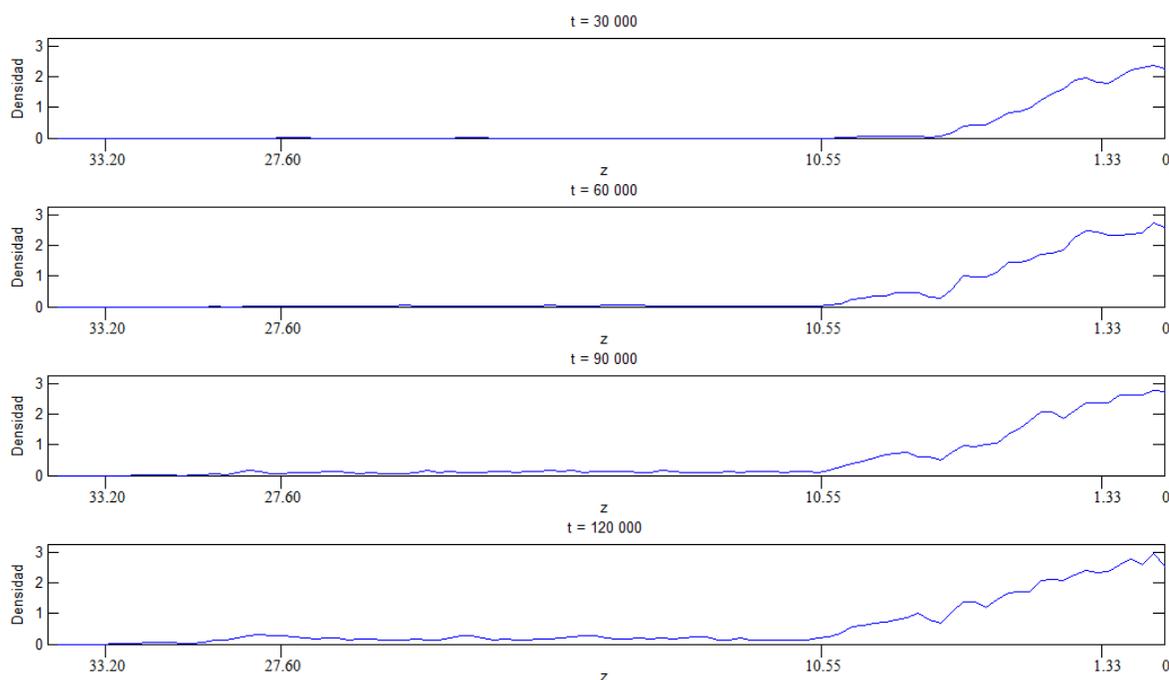


Figura 63. **Gráficas de densidad hasta el paso 120000 en el tiempo. La pendiente para todos los pasos no es suave y tiene saltos abruptos debidos a la influencia de los vugulos formados por el sólido que retiene las partículas y los cambios de porosidad de cada capa.**

o facilitan el avance de las partículas lo que resulta en rápidas variaciones en el flujo de partículas. La Figura 63 también muestra el efecto que tienen las fracturas en el flujo de partículas. Estas permiten el rápido tránsito de partículas de la segunda a la cuarta capa manteniendo una baja densidad de partículas casi constante a lo largo de las fracturas.

La Figura 64 muestra la evolución de la simulación numérica del paso 200000 al paso 500000 de tiempo simulado. Nótese que las primeras dos capas se encuentran totalmente saturadas en esta ventana de tiempo. Nótese también que en el paso 500000 el frente de partículas atravesó completamente la cuarta capa donde se encuentra el

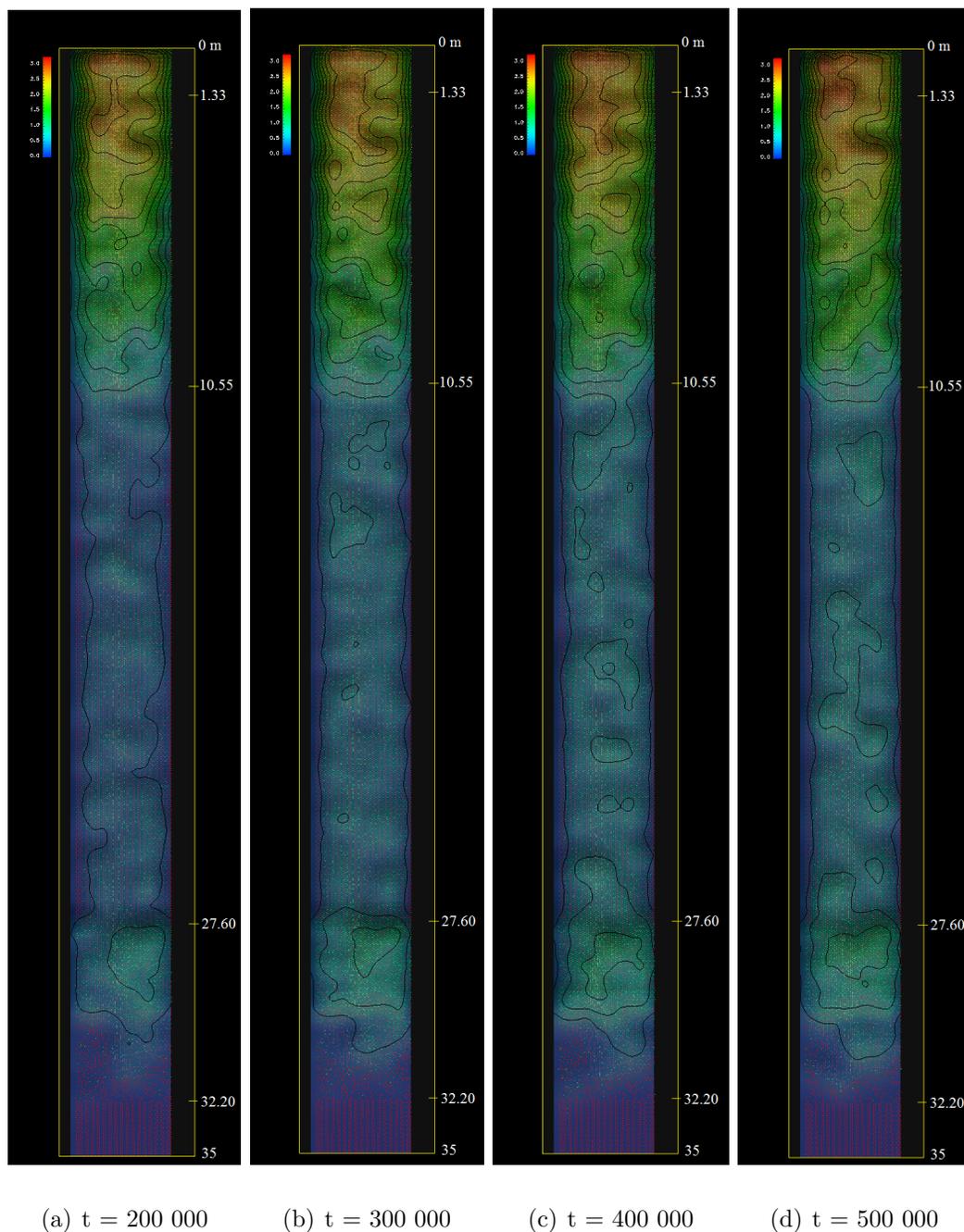


Figura 64. Evolución de la simulación numérica cada 100000 pasos en el tiempo. Las primeras dos capas se encuentran totalmente saturadas de partículas y estas se canalizan en las fracturas atravesando casi por completo la cuarta capa donde se encuentra el nivel freático (Figura 58).

nivel freático (58). La Figura 65 muestra una serie de cortes en las distribuciones de densidad mostrada en la Figura 64. Al igual que en la Figura 63 se puede apreciar que la distribución de densidad sigue una distribución cuasilineal en la escala de las capas mientras que en la escala más fina intracapas el flujo de partículas es fuertemente dinámico.

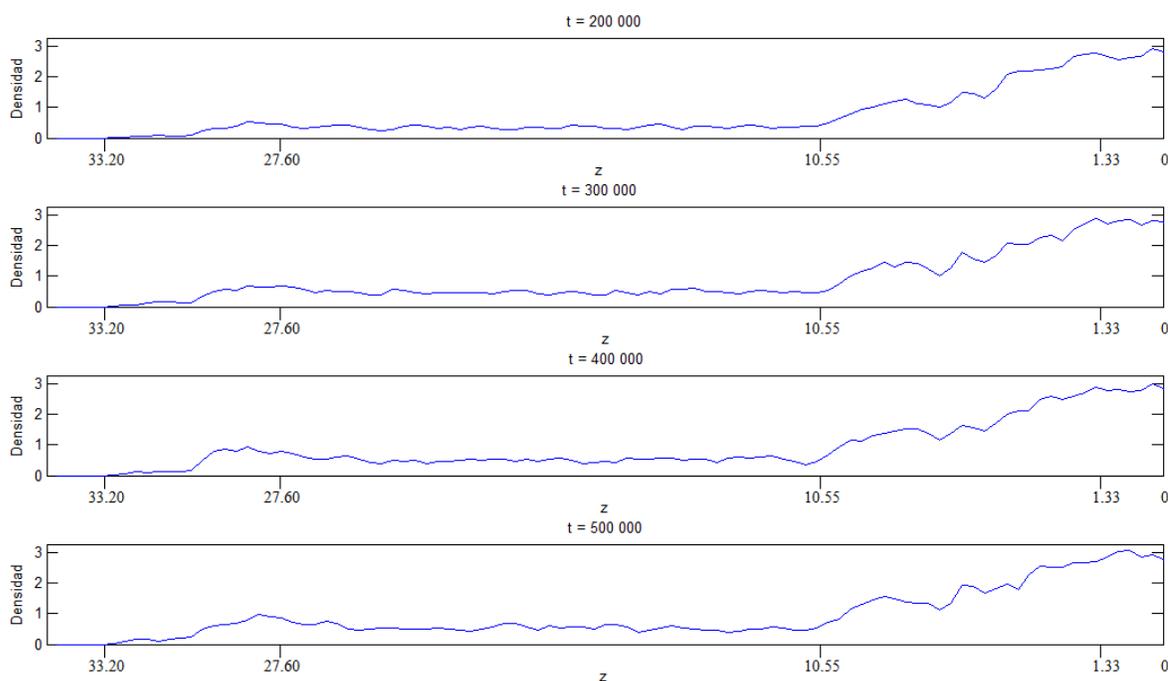


Figura 65. Gráficas de densidad hasta el paso 500000 en el tiempo. Las dos primeras capas se encuentran saturadas de partículas. En zona de fracturas disminuye la densidad de partículas. En la cuarta capa hay un aumento progresivo de densidad de partículas conforme aumenta la canalización de partículas en las fracturas.

La Figura 65 también muestra que en la cuarta capa hay un aumento progresivo de la densidad de partículas. Estas incluso llega a ser mayor que en la zona fracturada. En la zona fracturada, por otra parte, la densidad es casi constante, sugiriendo un flujo continuo de partículas en las fracturas de la capa superior a la cuarta capa.

IV.5 Análisis adimensional

Los resultados de Salas-García *et al.* (2011) fueron obtenidos utilizando el sistema internacional de medidas mientras que los resultados de los modelos fueron obtenidos en un sistema de unidades referido a la malla. Para poder comparar los resultados de los modelos debemos cambiar el espacio de unidades de los modelos a un espacio común. Ahora se realizará un análisis adimensional del problema para construir un grupo de parámetros independientes del sistema de unidades empleado. Estos los podemos utilizar para los resultados de los modelos y referirlos en un sistema de unidades común sin dimensiones. Para ello se considera que ambos modelos se comportan como procesos difusivos lineales. Recordemos la ecuación de difusión esta dada por la expresión:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \quad (46)$$

donde ρ es la densidad. Ahora normalizamos la ecuación 46 dividiendo la ecuación entre ρ_0 . Al normalizar entre densidad de partículas $[\text{M L}^{-2}]$ la ecuación 46 describe equivalentemente tanto densidad de partículas $[\text{M L}^{-2}]$ como concentración $[\text{M L}^{-3}]$ como se muestra a continuación:

$$C_N = \frac{C_1}{C_0} = \frac{\frac{m_1}{v}}{\frac{m_0}{v}} = \frac{m_1 v}{m_0 v} = \frac{m_1}{m_0} \quad (47)$$

$$\rho_N = \frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\frac{N_p m_1}{a}}{\frac{N_p m_0}{a}} = \frac{N_p m_1 a}{N_p m_0 a} = \frac{m_1}{m_0} \quad (48)$$

donde C_N es la concentración normalizada, ρ_N es la densidad normalizada, m_1 es la masa en un instante dado, m_0 es la masa inicial, v es el volumen, a es el área y N_p es el número de partículas. Ahora podemos escribir la ecuación 46 normalizada como:

$$\frac{\partial C_N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_N}{\partial z^2}. \quad (49)$$

Para adimensionalizar la ecuación 49 se reemplazan las variables de la ecuación por variables adimensionales (Herranz-García y Arenas-Gómez, 1989). Las variables seleccionadas son t , z y D , las cuales se pueden expresar como el producto de una cantidad adimensional (t^* y x^*) con una cantidad dimensional característica (τ , h y Kh) como se muestra en las siguientes ecuaciones:

$$t = t^* \tau, \quad (50)$$

$$z = z^* h, \quad (51)$$

$$D = Kh, \quad (52)$$

$$\tau = \frac{h^2}{D} = \frac{h}{K}, \quad (53)$$

$$t^* = \frac{t}{\tau}, \quad (54)$$

donde h es la longitud característica del modelo, τ es el tiempo característico del modelo y K es la conductividad hidráulica. Reemplazando las variables adimensionales en la ecuación 49:

$$\frac{\partial C_N}{\tau \partial t^*} = \frac{D}{h^2} \frac{\partial^2 C_N}{\partial z^{*2}}, \quad (55)$$

sustituyendo τ en la ecuación 55 tenemos:

$$\frac{D}{h^2} \frac{\partial C_N}{\partial t^*} = \frac{D}{h^2} \frac{\partial^2 C_N}{\partial z^{*2}}, \quad (56)$$

ahora multiplicamos la ecuación 56 por $\frac{h^2}{D}$:

$$\frac{h^2}{D} \left(\frac{D}{h^2} \frac{\partial C_N}{\partial t^*} = \frac{D}{h^2} \frac{\partial^2 C_N}{\partial z^{*2}} \right). \quad (57)$$

Finalmente surge naturalmente la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C_N}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 C_N}{\partial z^{*2}} \quad (58)$$

Nótese que esta no involucra relaciones que vinculen mecanismos de transferencia de masa, a través de la constante D . Es decir, los modelos son equivalentes a cualquier escala espacial y a cualquier escala de tiempo. Entonces podemos compara nuestros modelos realizando los cálculos con las ecuaciones 50, 51, 52 53 y 54. Sin embargo, antes necesitamos calcular la conductividad hidráulica. Esta se calcula de la siguiente manera:

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} \quad (59)$$

donde k es la permeabilidad del medio, ρ es la densidad, g es la gravedad y μ es la viscosidad dinamica. La viscosidad es una función de las reglas de colisiones usadas y la densidad de el fluido. Para el modelo FHP con simples reglas de colisiones podemos utilizar la siguiente aproximación para calcular la viscosidad (Rothman y Zaleski, 2004) (Frisch *et al.*, 1987), ver Apéndice A:

$$\mu = \frac{1}{28d(1-d)^3} \frac{1}{1-4\frac{d}{7}} - \frac{1}{8}, \quad d = \frac{\rho}{6} \quad (60)$$

Para el calculo de la permeabilidad usaremos la ley de Kozeny (Carman, 1937):

$$k = \frac{\phi^3 l^2}{c(1-\phi)^2} \quad (61)$$

donde c es la constante de Kozeny, el cual es un parámetro experimental que toma valores según la geometria de los capilares. Para arreglos al azar lleno de esferas uniformes en las que la porosidad oscila entre 0.26 y 0.48 la constante de Kozeny es de 4.8 con un rango de variación, debido a un rango de incertidumbre experimental, de 4.5 a 5.1; ϕ es la porosidad y l es el tamaño de las partículas. Para el modelo FHP el tamaño de las partículas es:

$$l \approx \frac{a}{4}, \quad (62)$$

donde a es la arista del red hexagonal. La Tabla VII muestra los valores de la viscosidad, μ , la densidad promedio, d , la constante de Kozeny, c , y la permeabilidad, k , del modelo FHP. Los valores para calcular estas variables se tomaron del paso 500000 del modelo FHP que es cuando se encuentra totalmente saturado.

Tabla VII. **Valores de densidad (d), viscosidad (μ), constante de Kozeny (c) y de permeabilidad (k). Estos valores fueron obtenidos en el paso 500000, cuando se encuentra saturado.**

<i>Modelo</i>	d	μ	c	k
FHP	0.1264	0.528672	5.1	4.5×10^{-7}

La Tabla VIII muestra la longitud característica de los modelos que corresponde a la profundidad aproximada del nivel freático y el tiempo característico corresponde al tiempo en el que el contaminante alcanza el nivel freático. Adicionalmente se muestra los valores de conductividad hidráulica y coeficiente de difusión para ambos modelos.

Tabla VIII. **Valores característicos del modelo continuo y del modelo FHP. ul corresponde a unidades de longitud del modelo FHP o longitud modelada y ut corresponde a unidades de tiempo del modelo FHP o tiempo modelado.**

<i>Modelo</i>	h	K	D	τ
UNSAT	30 m	$3.17 \times 10^{-7} \frac{m}{s}$	$9.5 \times 10^{-6} \frac{m^2}{s}$	94608000 s
FHP	86.6 ul	$4.2e \times 10^{-4} \frac{ul}{ut}$	$1.1 \times 10^{-4} \frac{ul^2}{ut}$	206626.39 ut

La Tabla IX muestra los valores de tiempo adimensional que tarda el contaminante en atravesar cada capa para ambos modelos.

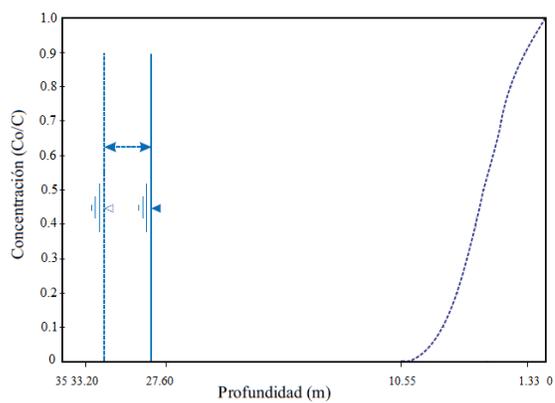
Tabla IX. **Valores característicos del modelo continuo y del modelo FHP.**

<i>Modelo</i>	Tiempo	<i>Capa1</i>	<i>Capa2</i>	<i>Capa3</i>	<i>Capa4</i>	<i>Capa5</i>
UNSAT	segundos	2592000	31536000	63072000	94608000	126144000
	adimensional	0.027	0.333	0.666	1	1.333
FHP	simulado	1000	50000	110000	200000	250000
	adimensional	0.0048	0.241	0.532	1	1.209

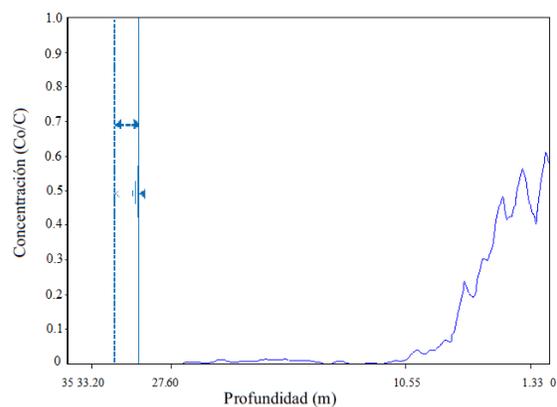
La Figura 66 muestra las gráficas de concentración para las primeras tres capas y la Figura 67 muestra las gráficas de concentración para las últimas dos capas. Claramente se puede observar que en el modelo FHP el contaminante atraviesa las capas en un menor tiempo.

IV.6 Presión

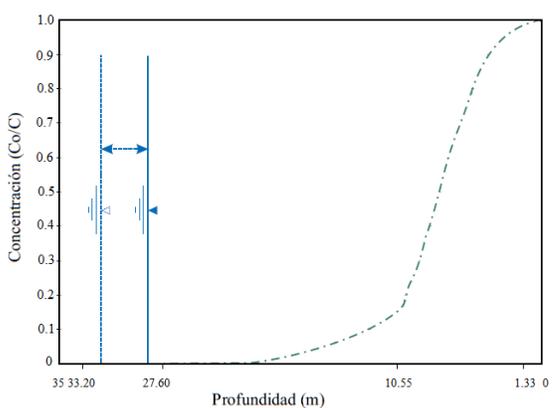
Hasta ahora se ha hecho un análisis de los cambios en la distribución de concentración y como esta se propaga en el medio poroso simulado. Hemos visto también que el modelo FHP tiene fuertes efectos dinámicos que producen cambios abruptos temporales en la escala intraestratos. Esta sección presenta un análisis de las fuerzas que propulsionan el avance de la concentración de partículas y la formación de lóbulos en las interfaces entre estratos y vugulos. Para ello primero debemos de reconocer que el modelo FHP se comporta como un gas ideal en donde las colisiones de las partículas son elásticas conservando energía y momento. Entonces, de la ley constitutiva de los gases ideales se tiene que la colección de partículas debe obedecer la relación



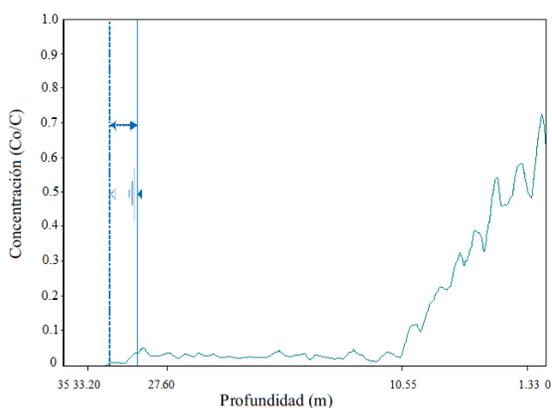
(a) tiempo adimensional=0.333



(b) tiempo adimensional=0.241

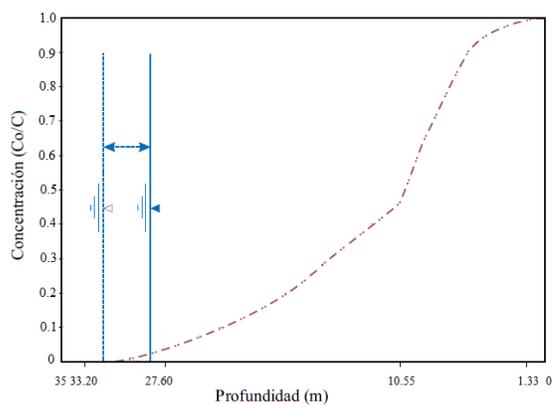


(c) tiempo adimensional=0.666

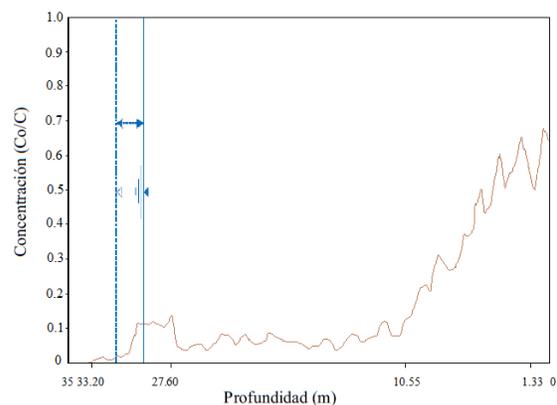


(d) tiempo adimensional=0.532

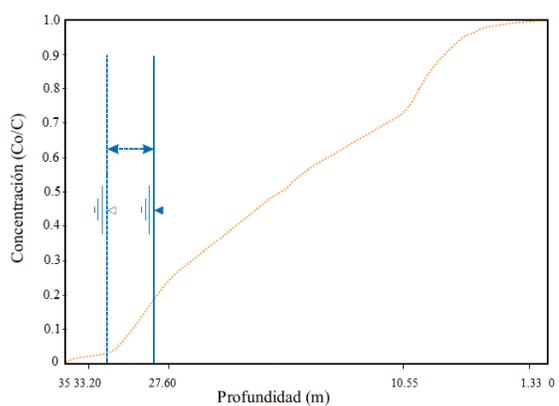
Figura 66. **Gráficas de concentración para las primeras tres capas del modelo, el valor que se muestra es el tiempo adimensional que tarda el contaminante en atravesar cada capa. Las gráficas a) y c) corresponden al modelo UNSAT y las gráficas b) y d) corresponden al modelo FHP.**



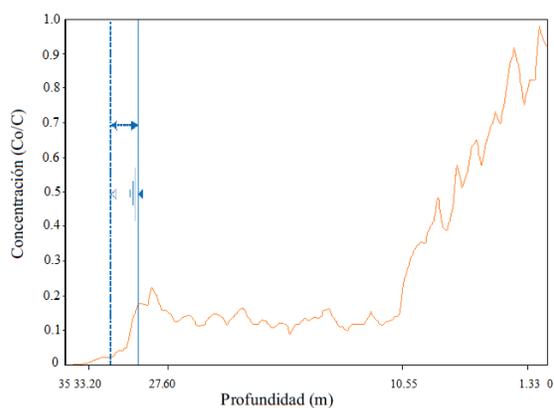
(a) tiempo adimensional=1



(b) tiempo adimensional=1



(c) tiempo adimensional=1.333



(d) tiempo adimensional=1.209

Figura 67. Gráficas de concentración para las últimas dos capas del modelo, el valor que se muestra es el tiempo adimensional que tarda el contaminante en atravesar cada capa. Las gráficas *a)* y *c)* corresponden al modelo UNSAT y las gráficas *b)* y *d)* corresponden al modelo FHP.

$$PV = nRT \quad (63)$$

donde P es la presión, V es el volumen, n es el número de moles, R es la constante universal de los gases ideales y T es la temperatura en grados Kelvin. Ahora bien, sabemos que la cantidad de gas es:

$$nR = Nk_B \quad (64)$$

donde N es el número de partículas de gas y k_B es la constante de Boltzmann. Sustituyendo la ecuación 64 en la ecuación 63 tenemos :

$$PV_e = Nk_B T. \quad (65)$$

En esta expresión V_e es el volumen que contiene a las partículas y se calcula de la siguiente manera:

$$V_e = V(1 - \phi) \quad (66)$$

donde V es el volumen total ocupado por la fase sólida y el espacio poroso y ϕ es la porosidad de sólido. Sustituyendo la ecuación 66 en la ecuación 65 tenemos:

$$PV_e(1 - \phi) = Nk_B T. \quad (67)$$

Reagrupando términos obtendremos la expresión

$$\frac{PV}{k_B T} = \frac{N}{1 - \phi}. \quad (68)$$

Aquí hay que observar que el grupo de variables $\frac{k_B T}{V}$ define una presión característica asociada con la energía interna de la colección de partículas. Nombremos a esta presión σ . La ecuación 68, por lo tanto, la podemos expresar como:

$$P^* = \frac{P}{\sigma} = \frac{N}{1 - \phi}. \quad (69)$$

Donde P^* corresponde a la presión adimensional de la colección de partículas. Adicionalmente, la expresión 69 se puede interpretar como la razón entre trabajo hecho por la colección de partículas contra su energía interna.

A manera de ejemplo la Figura 68 muestra el cálculo de densidad y presión adimensional en la interface entre la primera y segunda capa, caracterizada por un cambio de porosidad que retarda el paso de partículas. El perfil también pasa por el vugulo que obstruye el flujo en la parte derecha de la litología simulada. El intervalo entre las figuras es de 100 pasos. La figura muestra que en la escala de los poros los cambios de presión son fuertemente dinámicos. Estos, además, se caracterizan por ser cuasi periódicos. Inicialmente se presenta una fase donde la presión intraporo se incrementa (Figura 68b); esta es seguida de una relajación (Figura 68d), repitiéndose en ciclo (Figura 68c). Quizá aún más relevante es el hecho que dichos cambios de presión fluctúan alrededor de un estado estacionario que se presenta en una escala más grande. Este es producto

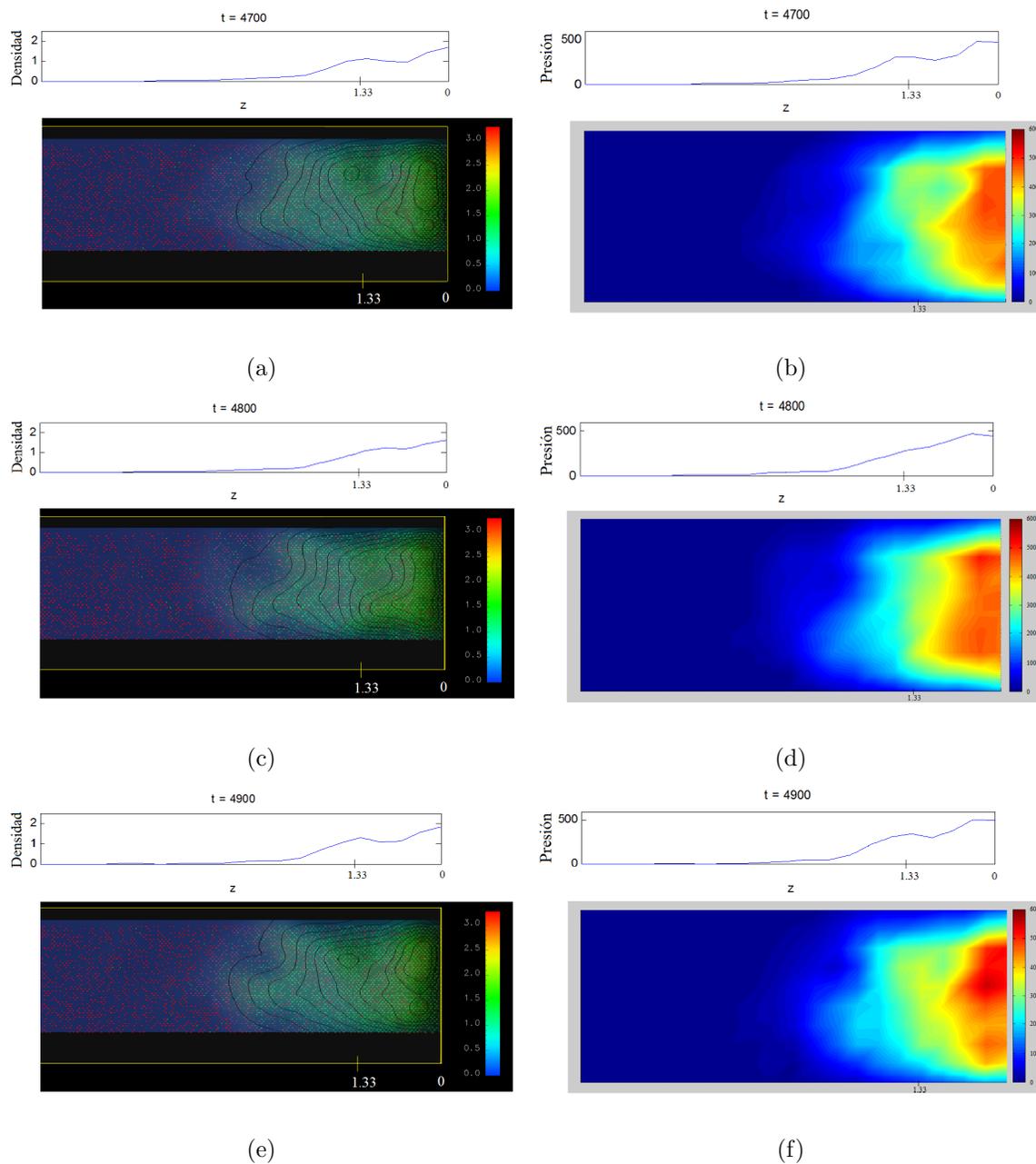


Figura 68. Las imágenes *a)*, *c)* y *e)* corresponden a la densidad de partículas en la región de transición entre la primera y segunda capa. Las imágenes *b)*, *d)* y *f)* muestran la presión adimensional en la región de transición entre la primera y segunda capa.

de auto-organización entre el sistema de partículas y la estructura del medio poroso. Es decir, este estado aparece naturalmente en la simulación y está controlado por reglas de interacción entre las partículas y el sólido.

De cierta manera el modelo se comporta como el modelo de una pila de arena descrito por Bak *et al.* (1988). El modelo puede describirse en términos cualitativos de la siguiente manera. Si añadimos arena a una base horizontal como se muestra en la Figura 69, se generará una pila de arena de forma cónica en estado estacionario. En dicho estado la superficie de la pila de arena tiene, en promedio, un ángulo constante con el plano horizontal conocido como ángulo de reposo. Sin embargo, esta superficie no es completamente estable. Más bien se encuentra en el umbral entre estabilidad y caos. Como resultado la adición de granos de arena da lugar a el desarrollo de avalanchas en la pila. Los sistemas que se comportan de esta manera se les denominan sistemas críticamente auto-organizados (Bak *et al.*, 1988).

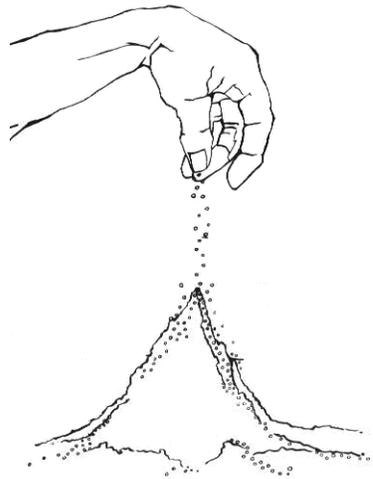


Figura 69. Pila de arena formada añadiendo lentamente los granos de arena, uno tras otro. La auto-organización crítica emerge de la interacción entre la adición de energía potencial a la pila de arena y su disipación vía interacciones entre granos.

En el caso de la pila de arena la auto-organización crítica emerge de la interacción entre la adición de energía potencial a la pila de arena y su disipación vía interacciones entre granos. Para el caso del flujo en el medio poroso simulado, la auto-organización crítica resulta de la interferencia de la estructura de la matriz sólida con el flujo de partículas (Figura 70).

A bajas densidades de partículas estas avanzaran rápidamente a lo largo de los poros (Figura 70a). De hecho, las partículas describiran caminatas aleatorias con una media cuadrática del desplazamientos del orden del tamaño del poro. Si la tasa de inyección de partículas en el medio poroso es mayor que la tasa de disipación, entonces los poros se comenzaran a saturar y las partículas comenzaran a interactuar entre sí (Figura 70b). En este régimen la media cuadrática del desplazamiento es del orden de la longitud de arista lo que reduce la velocidad del flujo en el poro. Esto favorece aún más la acumulación de partículas en el poro. Finalmente, en altas densidades de partículas, la tasa de inyección de partículas en el poro es igual que la tasa de disipación. El poro se encuentra saturado y todas las partículas dentro del poro estan interactuando entre sí (Figura 70c). El proceso de flujo se torna rápido y las partículas avanzan en forma de avalanchas.

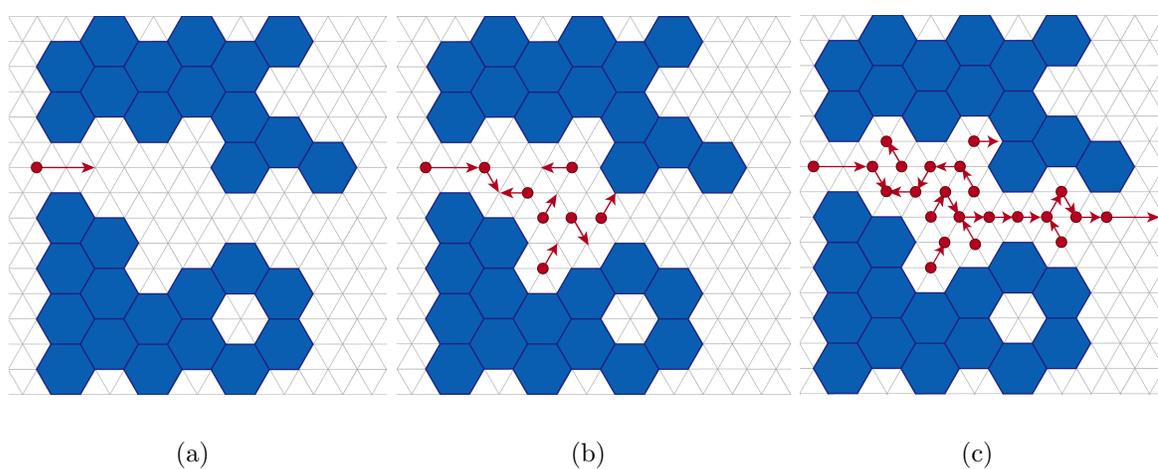


Figura 70. **El sistemas críticamente auto-organizados resulta de la interferencia de la estructura de la matriz sólida con el flujo de partículas .** *a)* Las partículas avanzan rápidamente a lo largo de los poros. *b)* Los poros se comienzan a saturar y las partículas comienzan a interactuar entre sí. *c)* El poro se encuentra saturado y las partículas avanzan en forma de avalanchas.

Capítulo V

CONCLUSIONES

Se implementó el modelo FHP para estudiar fenómenos de dispersión de contaminantes. Este modelo simula en la escala natural el proceso y considera que partículas coloidales de contaminante se comportan como un gas ideal. Es decir, las partículas coloidales interaccionan entre sí y con el medio vía colisiones elásticas. Los resultados obtenidos muestran que el modelo FHP tiene fuertes efectos dinámicos. En simulaciones con grandes números de partículas y en ausencia de una matriz porosa el sistema se comporta como una onda difusiva. En las simulaciones se observa lo siguiente:

1. En los primeros pasos de la simulación numérica el fenómeno dominante es (auto)difusión.
2. En pasos intermedios el fenómeno dominante es de propagación de onda.
3. En pasos avanzados el fenómeno dominante es de onda difusiva.

La ecuación del telegrafista es la generalización más simple que describe el comportamiento de la colección de partículas. Este comportamiento aparece en el sistema de partículas debido a que le lleva un tiempo característico establecer el flujo macroscópico $q = D\nabla C$ cuando se introduce un cambio instantáneo en la concentración.

El modelo FHP se aplicó a un caso real de infiltración de aguas superficiales contaminadas (Salas-García *et al.*, 2011). Los contaminantes utilizados en el modelo se asumen conservativos (sin reacciones). La simulación numérica considera un medio estratificado dividido en cinco capas que forman tres regiones principales: una zona

superior con estructura vugular, una zona intermedia con estructura fracturada y una zona inferior con estructura vugular donde se localiza el nivel freático.

En las capas con porosidad vugular (los primeros 10.5 m y a la región del nivel freático) el flujo de contaminante se dispersa en forma de avalanchas dando lugar a un sistema críticamente auto-organizado. La zona intermedia fracturada canaliza el flujo de contaminante, lo que favorece el rápido transito de las partículas a través de esta zona.

La simulación muestra que el contaminante en el modelo FHP alcanza en un menor tiempo el nivel freático con respecto al modelo UNSAT. Además, la solución numérica del modelo FHP difiere fuertemente de la solución de la ecuación de Richards la cual es empleada frecuentemente para simular el flujo en medios porosos.

Referencias

- Bak, P., Tang, C., y Wiesenfeld, K. (1988). Self-organized criticality. *Physical Review A*, **38**(1): 364–374.
- Berg, H. C. (1993). *Random Walks in Biology*. Princeton University Press, New York, expanded edition. 152 pp.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., y Lightfoot, E. (2001). *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, New York, segunda edición. 905 pp.
- Braun, E. (2003). *Un Movimiento en ZigZag*. Fondo de Cultura Económica, México, tercera edición. 106 pp.
- Caputo, J. G. y Stepanyants, Y. A. (2008). Front solutions of richards' equation. *Transport in Porous Media*, **74**(1): 1–20.
- Carman, P. C. (1937). Fluid flow through granular beds. *Transactions, Institution of Chemical Engineers*, **15**: 150–166.
- Cooper, N. G., Eckhardt, R., y Shera, N. (1989). *From Cardinals to Chaos: Reflection on the Life and Legacy of Stanislaw Ulam*. Cambridge University Press, New York, primera edición. 175-217 p.
- Dhont, J. K. G. (2003). *An Introduction to Dynamics of Colloids*, Vol. 2. Elsevier Science B.V, The Netherlands, segunda edición. 642 pp.
- Farlow, S. J. (1993). *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. Dover Publications, New York, primera edición. 414 pp.
- Fetter, C. W. (1999). *Contaminant Hydrogeology*. Prentice Hall, New Jersey, segunda edición. 500 pp.
- Frisch, U., Hasslacher, B., y Pomeau, Y. (1986). Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Physical Review Letters*, **56**(14): 1505–1508.
- Frisch, U., D'Humieres, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, Y., y Rivet, J. P. (1987). Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems Publications*, **1**: 649–707.
- Herranz-García, A. y Arenas-Gómez, A. (1989). *Análisis dimensional y sus aplicaciones. I. Fundamentos*, Vol. 1. Universidad de Murcia, España, tercera edición. 81 p.
- Miller, C. T. y Weber, J. W. J. (1984). Modeling organic contaminant partitioning in ground-water system. *Ground Water*, **22**(5): 584–592.

- Ortigoza-Capetillo, G. M. (2007). Ecuaciones de advección-difusión, telégrafo y onda advectiva como superposiciones de transporte, difusión y onda: un enfoque didáctico. *Revista Mexicana de Física*, **53**(1): 48–51.
- Potter, M. C. y Wiggert, D. C. (2002). *Mecánica de Fluidos*. Thomson Internacional, México, tercera edición. 769 pp.
- Richards, L. A. (1931). Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Journal of Applied Physics*, **1**(5): 318–333.
- Rothman, D. H. y Zaleski, S. (2004). *Lattice-Gas Cellular Automata Simple Models of Complex Hydrodynamics*. Cambridge University Press, New York, primera edición. 297 pp.
- Rubin, J. (1983). Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions. *Water Resources Research*, **19**(5): 1231–1252.
- Salas-García, J., Gárfias, J., Llanos, H., y Martel, R. (2011). Modelo numérico 1d de la dinámica de infiltración en la zona no saturada, acuífero del valle de toluca. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, **28**(1): 147–160.
- Sukop, M. C. y Thorne, J. D. T. (2006). *Lattice Boltzmann Modeling, Introduction for Geoscientists and Engineers*. Springer, The Netherlands, primera edición. 172 pp.
- Witten, T. A. y Sander, L. M. (1981). Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Physical Review Letters*, **47**(19): 1400–1403.
- Wolf-Gladrow, D. A. (2000). *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction..* Springer, New York, primera edición. 308 pp.
- Wolfram, S. (2002). *A New Kind of Science*. Wolfram Media, Champaign, Illinois, primera edición. 1197 pp.

Apéndice A

PROPIEDADES MATERIALES MACROSCÓPICAS DEL MODELO FHP

Este apéndice muestra las expresiones analíticas de algunas de las propiedades materiales macroscópicas del modelo FHP. La tabla X muestra las expresiones derivadas por Frisch *et al.* (1987).

Tabla X. **Propiedades macroscópicas del modelo FHP. Tomados de Frisch et al. (1987).**

ρ_0	$7d$
μ	$\frac{1}{28d(1-d)^3} \frac{1}{1-4\frac{d}{7}} - \frac{1}{8}$
ζ	$\frac{1}{98} \frac{1}{d(1-d)} - \frac{1}{28}$
R_*^{max}	1.08
$d = d_{max}$	0.179

Los valores analíticos de Tabla X están parametrizados con la de densidad media por celda, $d = d_{max}$. Donde ρ_0 es la densidad media, μ es la viscosidad cinemática, ζ es la viscosidad neta (Bulk viscosity), R_*^{max} es el máximo valor del número de Reynolds y d_{max} es la densidad cuando el número de Reynolds tiene su valor máximo. La viscosidad μ y ζ son calculadas con las aproximación de redes de Boltzmann.