

Modelización de la dinámica de fluidos con autómatas celulares

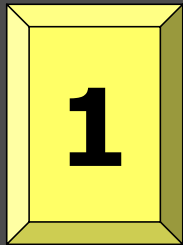
Liliana Di Pietro
INRA Avignon - France



Plan

- ⇒ Introducción a los autómatas celulares
- ⇒ Los gases en red: caso particular de autómata celular
- ⇒ Aplicaciones al estudio de la transferencia de fluidos en medio poroso
- ⇒ Un ejemplo: Obtención de un modelo macroscópico de transferencia preferencial de agua en suelos



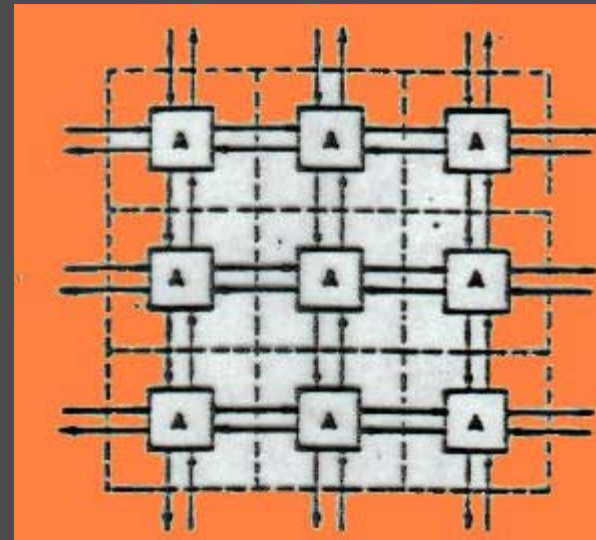


Autómatas Celulares



Qué es un Autómata Celular ?

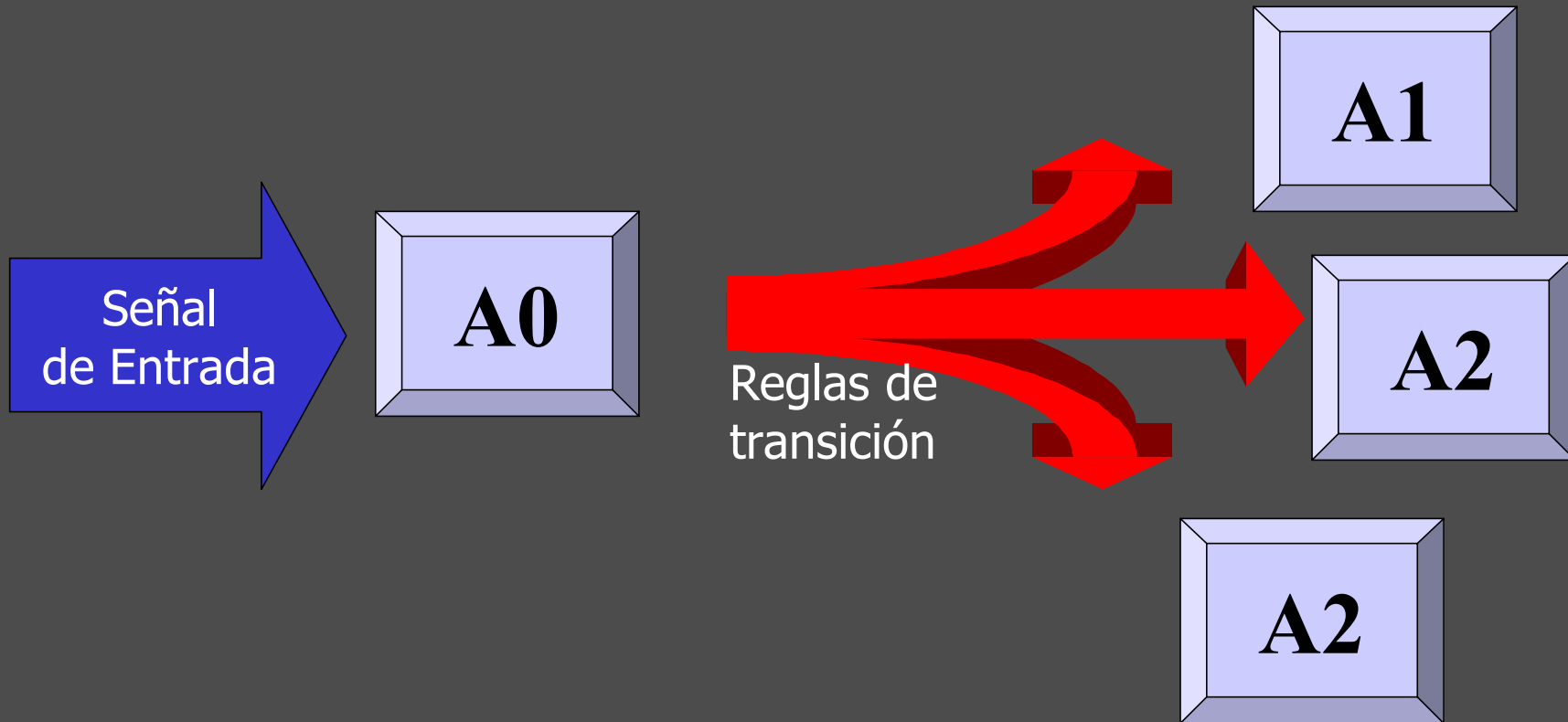
**Sistema matemático formado
por células idénticas**
*(robots virtuales programados
en un ordenador)*



**El sistema completo es capaz de simular
una dinámica compleja**

Cada célula : *robot o autómata*

Responde a una señal en función de una serie de reglas prefijadas (reglas de transición)



Aplicaciones

Método alternativo de resolución de ecuaciones diferenciales

Reglas de evolución
microscópicas

Ecuación diferencial
macroscópica



**Media estadística de
las variables
microscópicas
correspondientes**



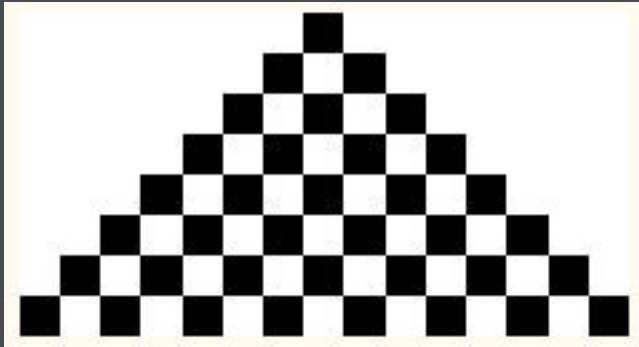
Ventajas

- Las reglas de transición se expresan en términos del álgebra de Boole
- Se evitan los problemas de redondeo del cálculo flotante
- Se adaptan fácilmente al cálculo paralelo
- Ningún tratamiento especial para los problemas no lineales

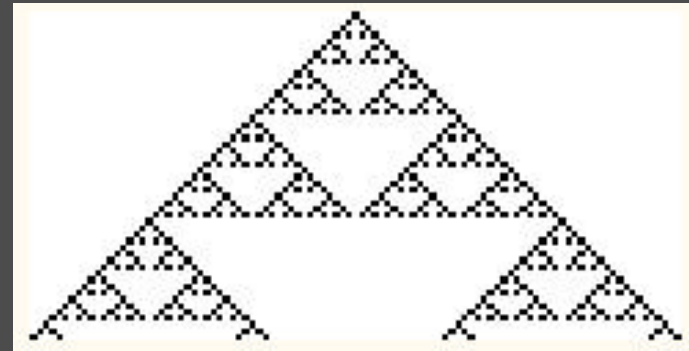


Algunos ejemplos

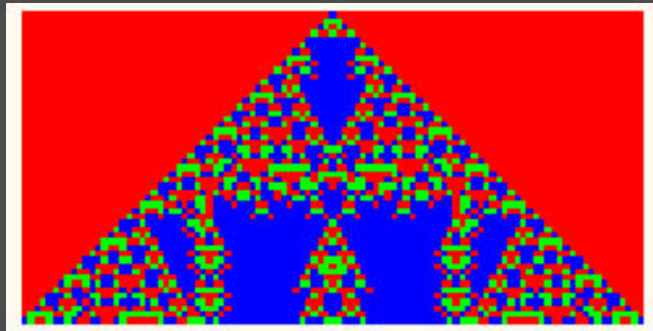
Wolfram, 1986



Estado final homogéneo



Estructura periódica fractal



Estructuras complejas:
ordenadas y aleatorias



Estructura caótica



2

Los gases en red

Un caso particular de autómatas celulares



Gas en red

Teoría cinética
de gases (1850)

Modelo molecular
discreto

Espacio continuo e isótropo
Tiempo continuo

Teoría de
Autómatas (1930)

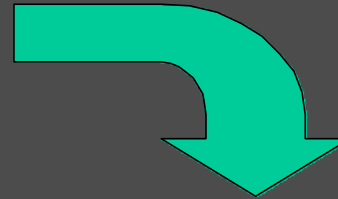
Estructura de autómata

Espacio discreto, isotropía incompleta
Tiempo discreto

Modelo de fluido



Principio físico



Las leyes macroscópicas no dependen del tipo de interacción microscópica

1 ➔

Leyes de conservación

2 ➔

Simetría del espacio

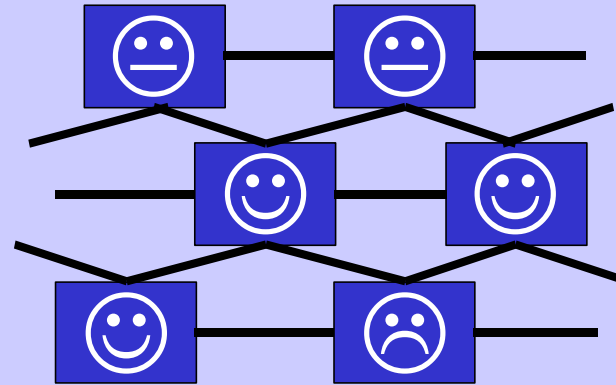


Gaz en Red

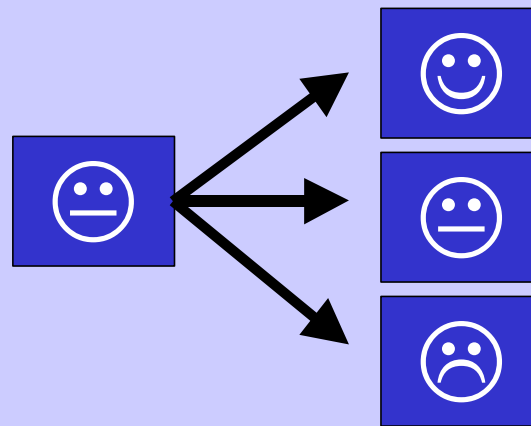
Un número finito de estados



Una position en una red discreta

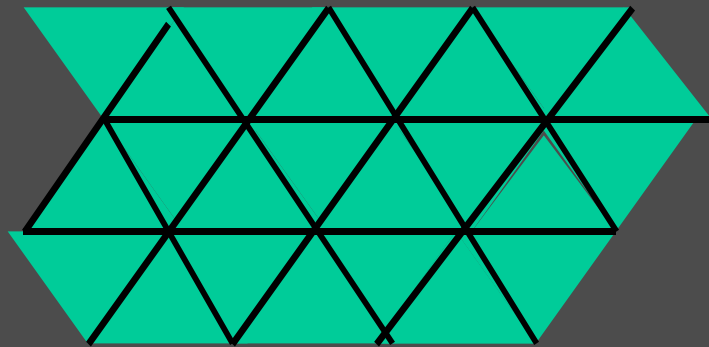


Una serie de reglas de transición



El espacio discreto (lattice)

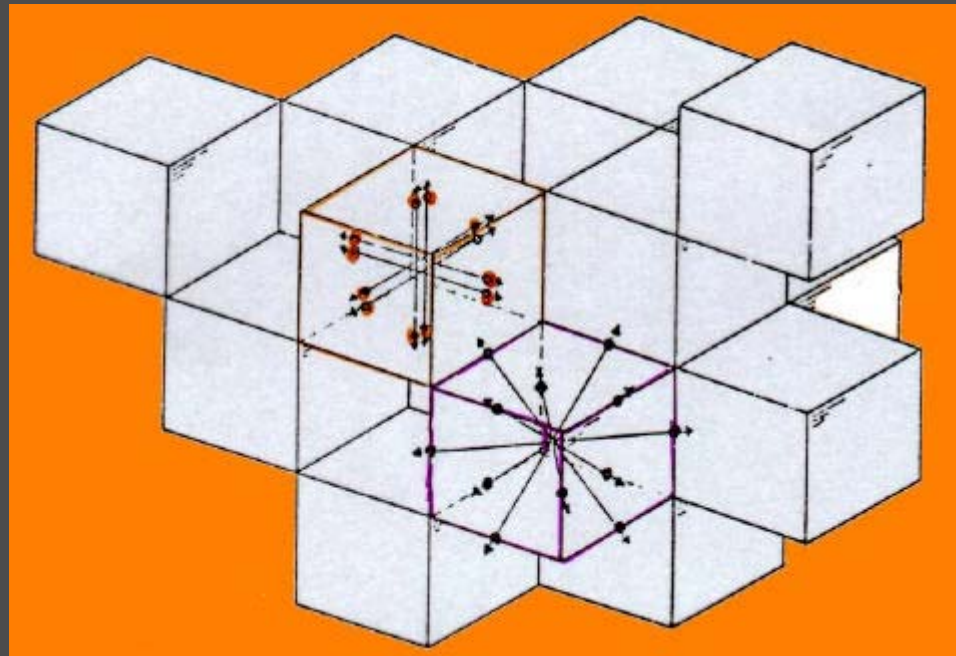
Se requiere que el orden de simetría de la red sea elevado



Triangular
2D

3D - FCHC

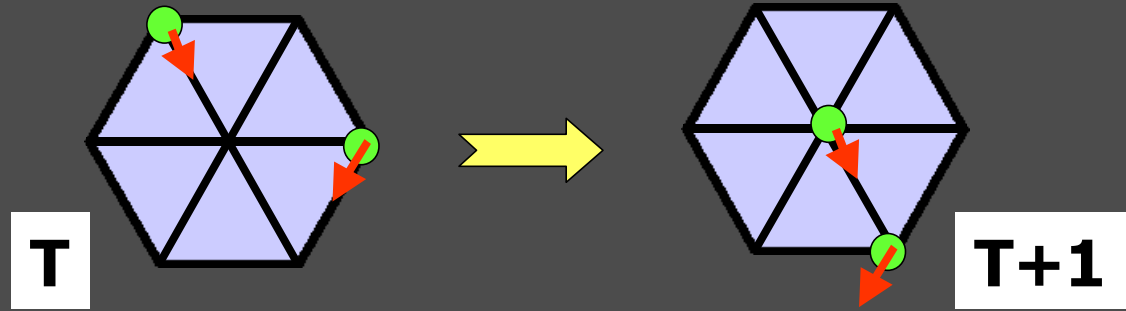
Proyección 3D del hipercubo 4D a caras centradas



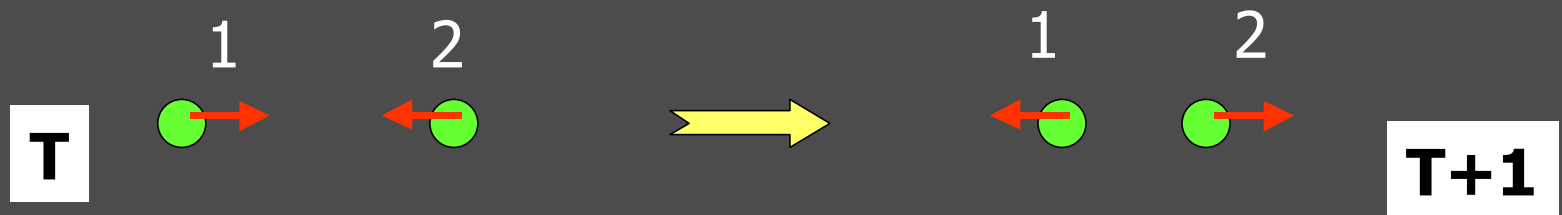
Reglas de transición

Conservación de la masa
y de la cantidad de movimiento

Propagación



Colisiones / Interacciones de largo alcance



Simetría

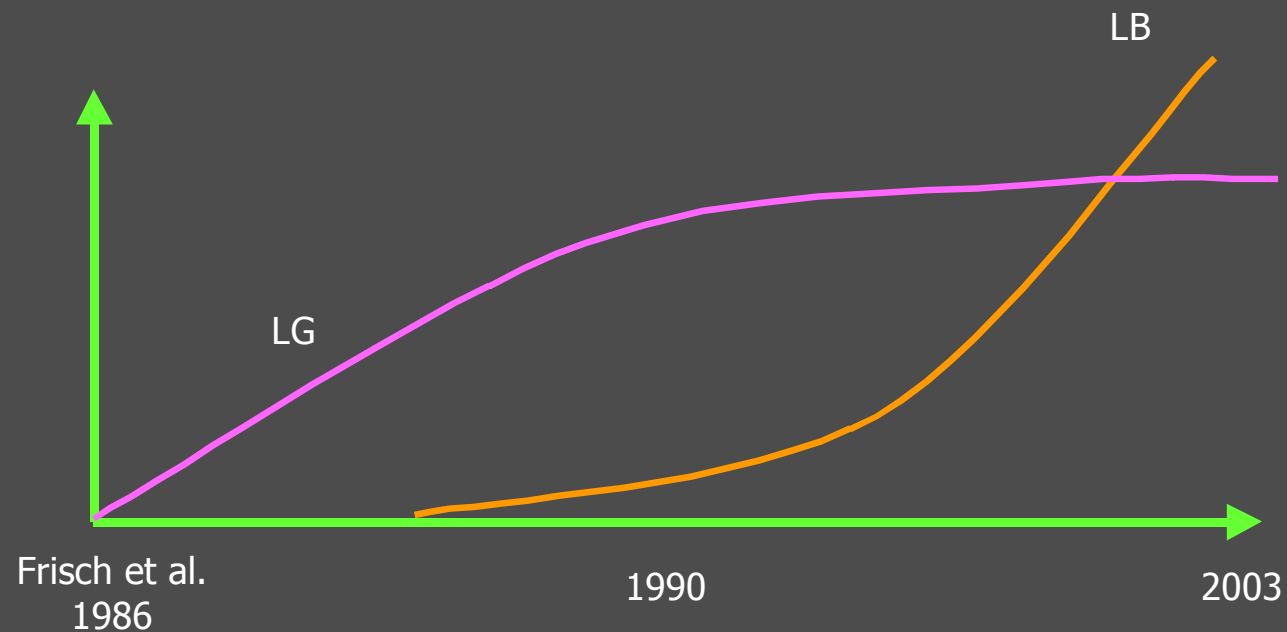
**Leyes de
Conservación**

Ecuaciones macroscópicas:
Navier - Stokes

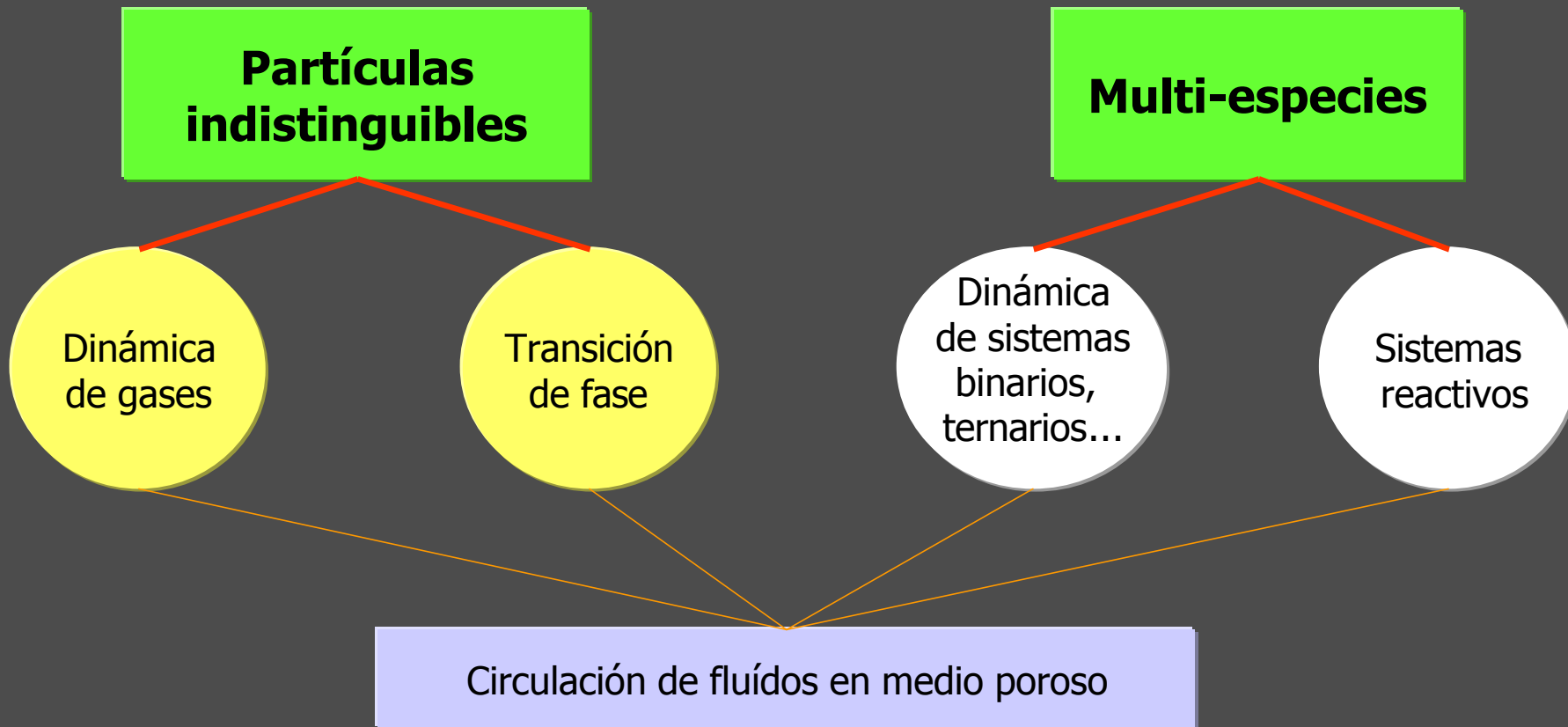
LG son un modelo de fluido



Gran variedad de modelos y de aplicaciones

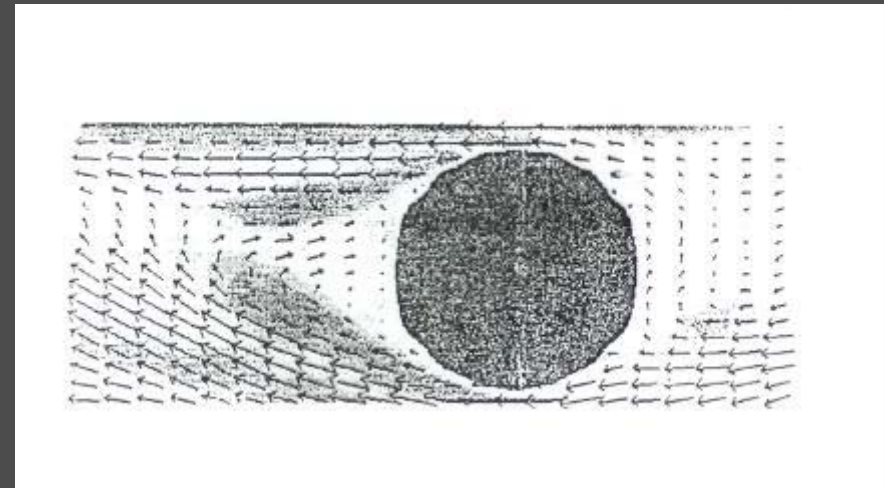
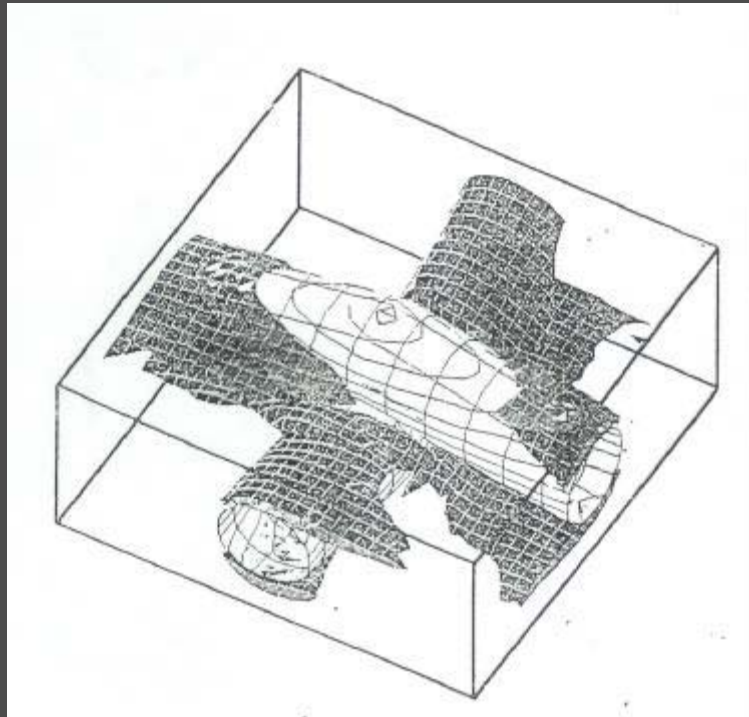


Gran variedad de modelos y de aplicaciones



Ejemplos

Simulación de la circulación
de un fluido alrededor de un
obstáculo

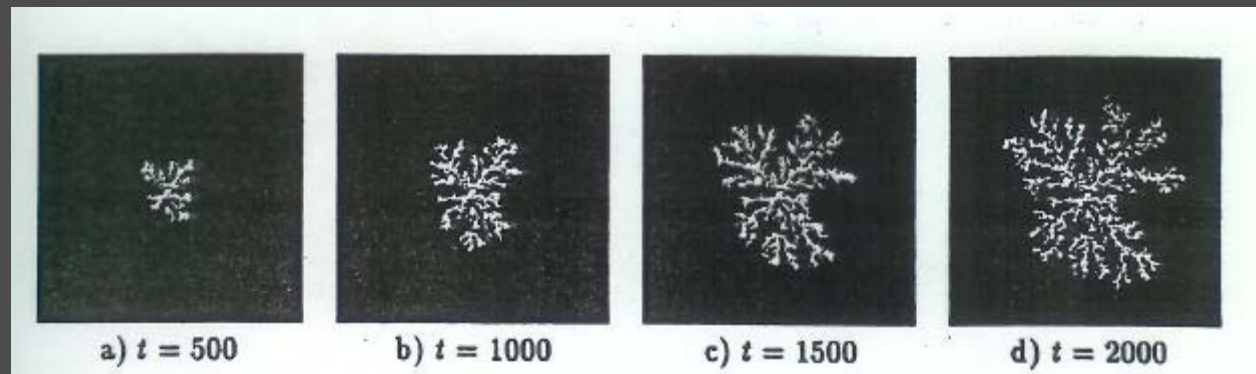
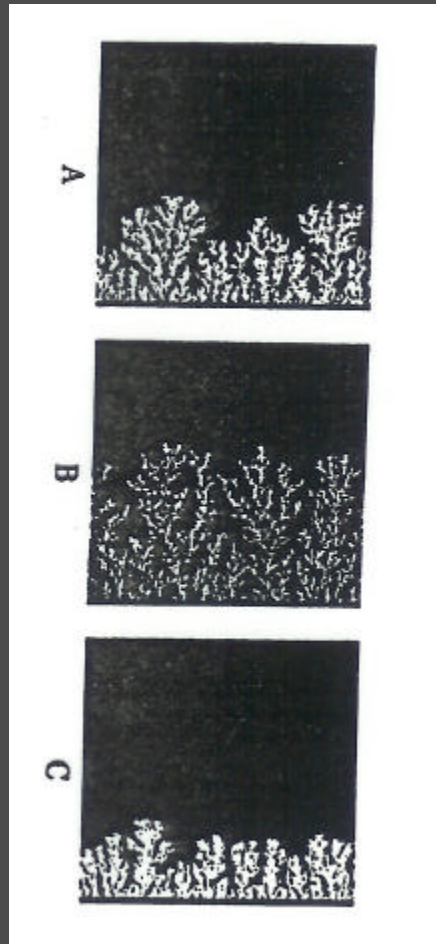


Sommers and Rem, 1992



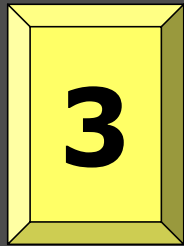
Ejemplos

Sedimentación y agregación
de cristales
(difusión en un fluido)



Bremond and Jeulin, 1994





Modelización de la dinámica de fluidos en un medio poroso



Adaptaciones

Simulación
de un medio
poroso



Ciertos nodos de la red se definen como sitios prohibidos para las partículas

Interacciones
fluido / solido



Se definen reglas de colisión particulares : reflexión, adsorción, reactividad, etc.

Fuerzas
externas
(ej: gravedad)



Las partículas son desviadas en una dirección dada con probabilidad p .



Modelo ILG

(Interacting Liquid-Gas, Appert et Zaleski, 1990)

Modelo de una sola especie con:

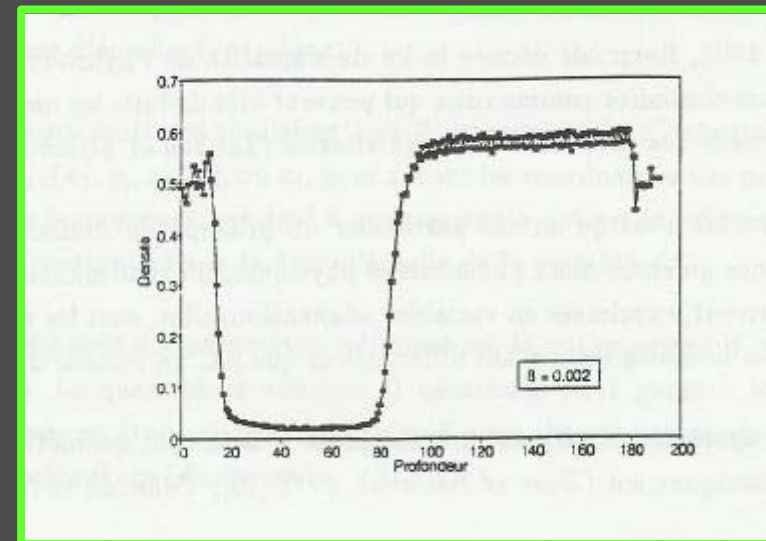
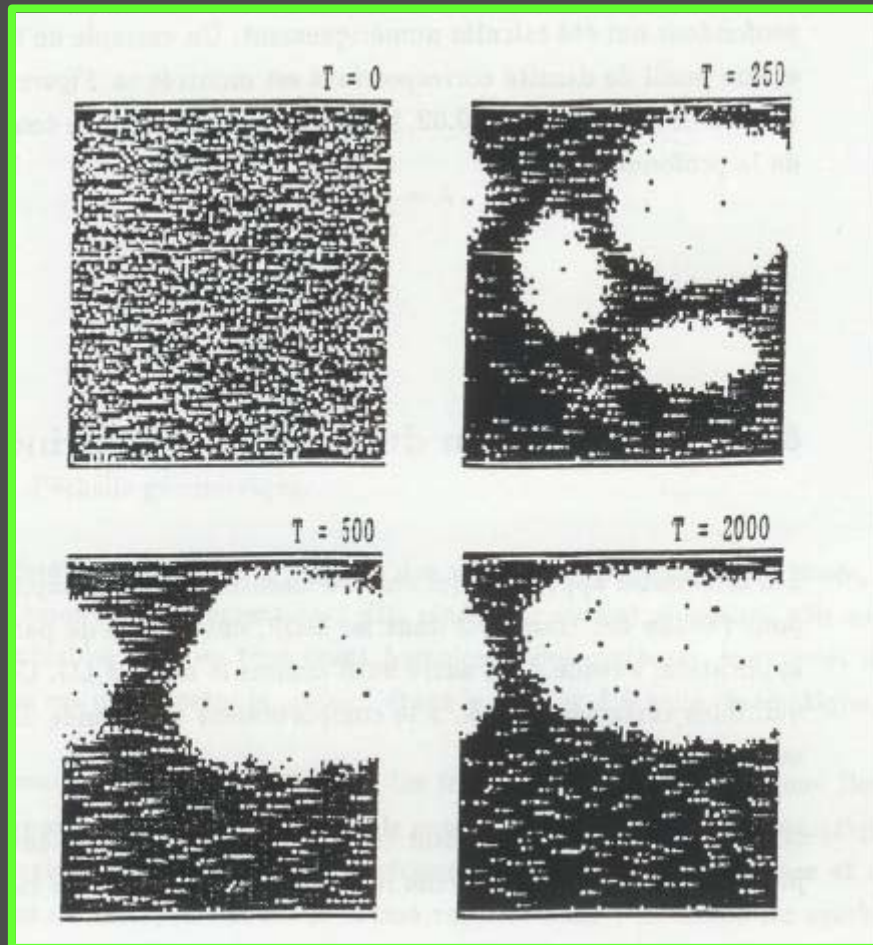
Interacciones de largo alcance entre las partículas

(simulación de fuerzas de Van der Waals de gases reales)

Fluido que realiza una transición de fase
Líquido-Gas



Transición de fase



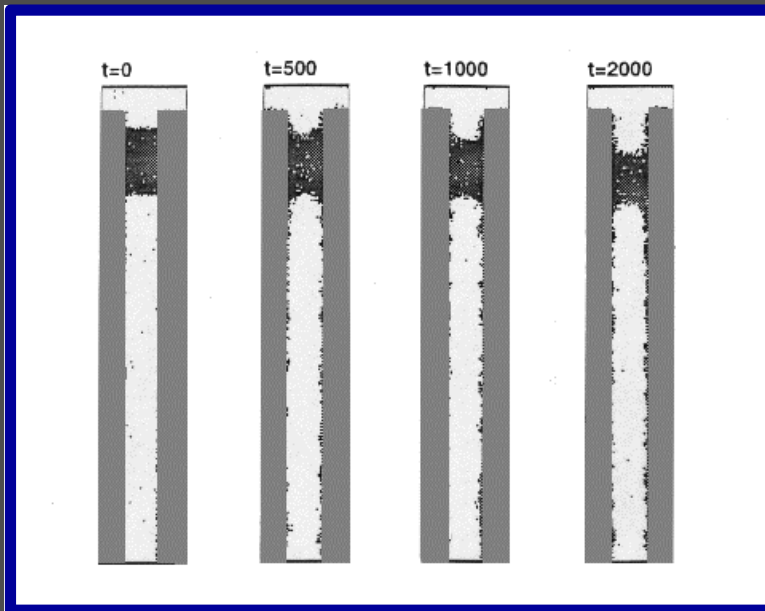
Adaptación al medio poroso no saturado

Condiciones iniciales:

- Medio poroso: un algoritmo probabilístico genera la distribución del sólido
- Fases líquida y gaseosa : densidades de equilibrio
- Fuerza de gravedad
- Propiedades de mojabilidad (fluido mojante como el agua)
- Principio de similaridad (igualdad de magnitudes adimensionales)

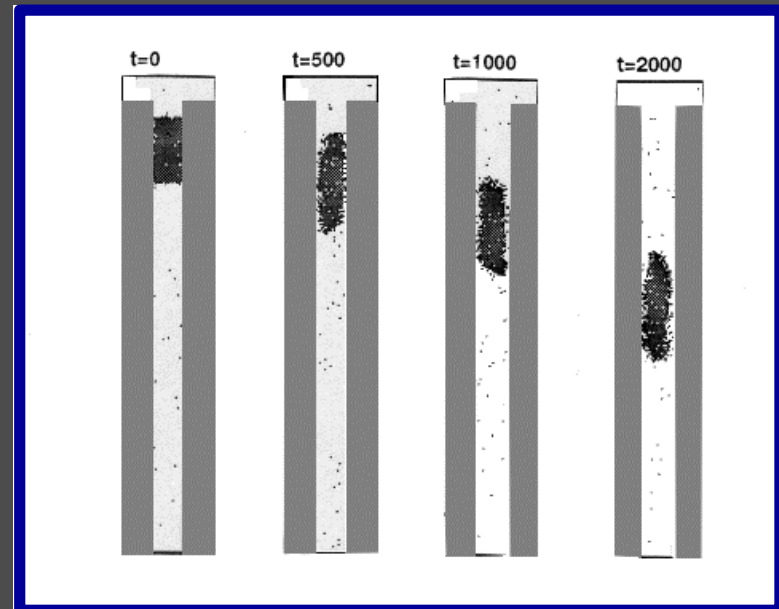


Mojabilidad

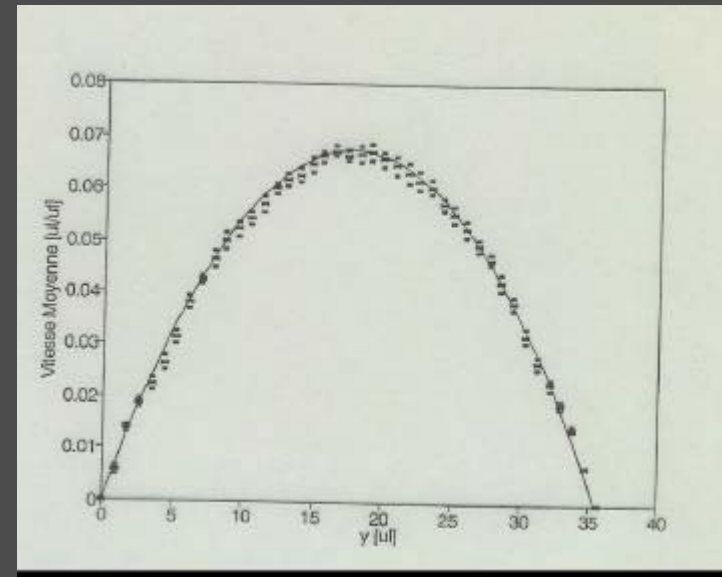
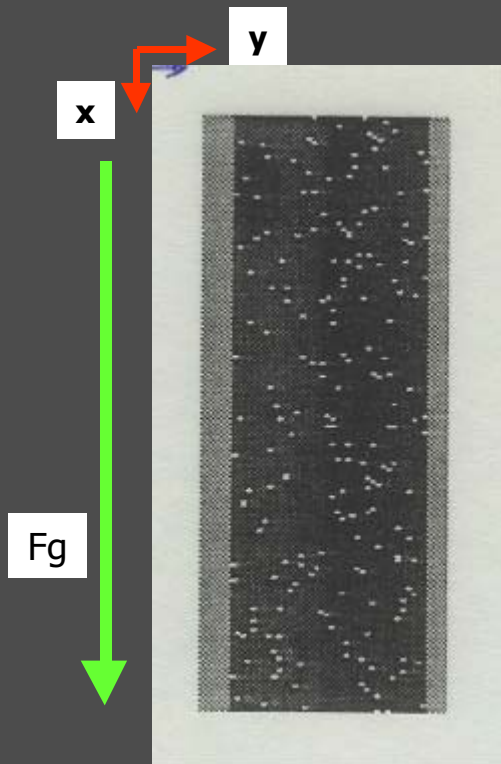


Fluido mojante

Fluido no-mojante

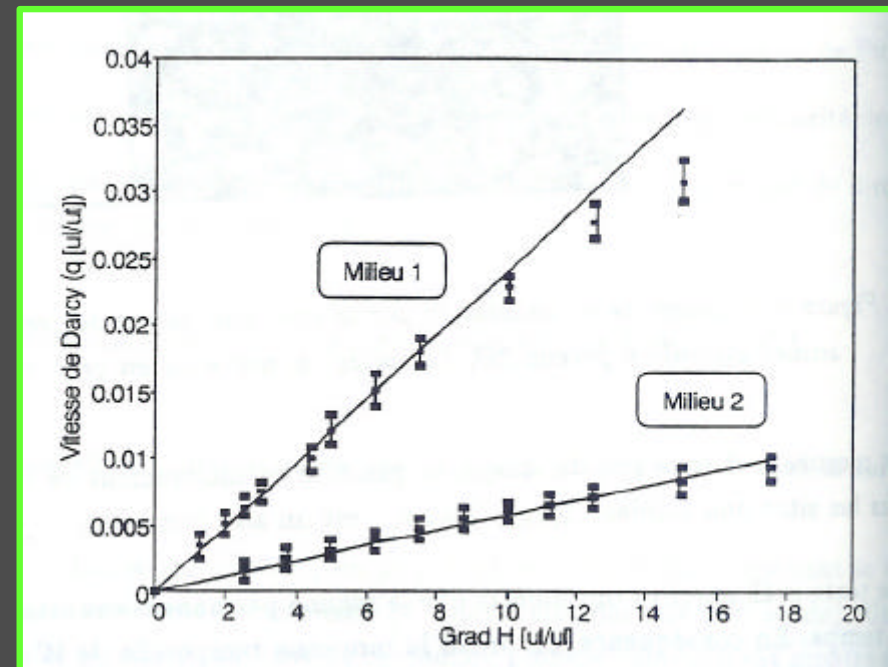
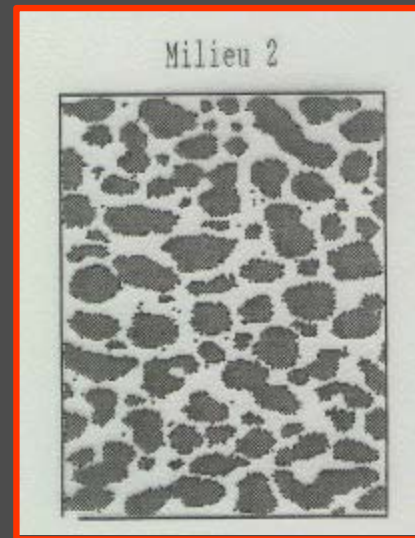
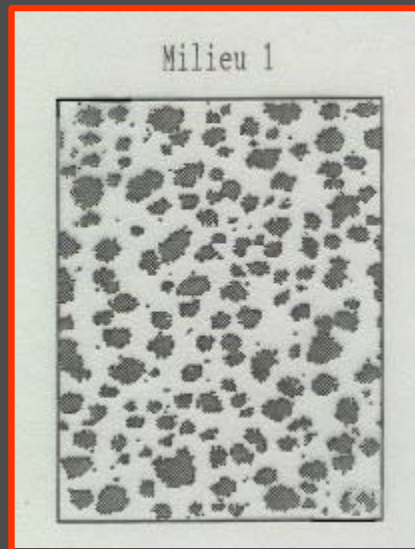


Ley de Poiseuille



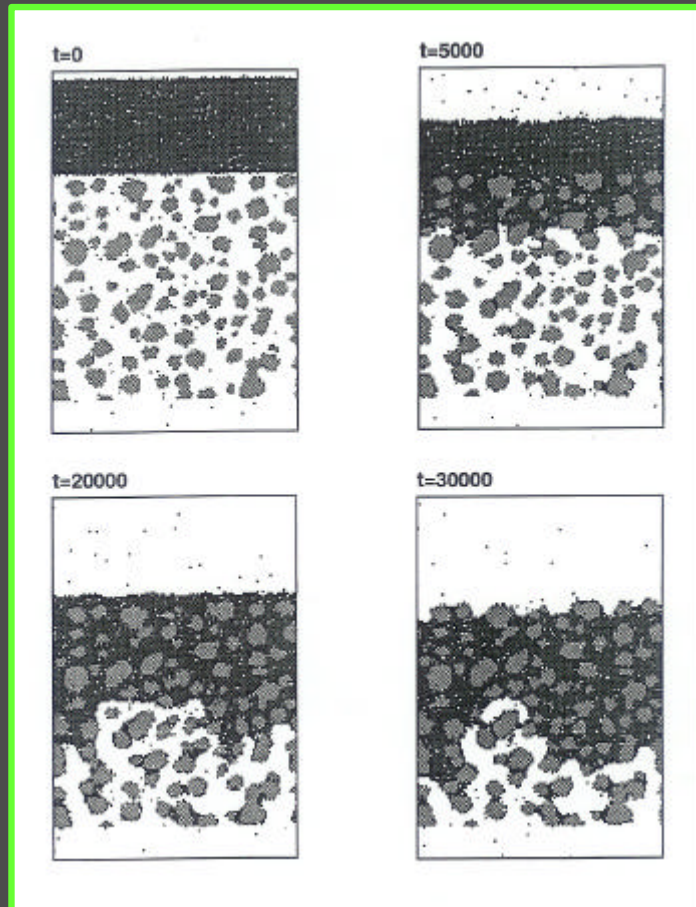
Perfil de velocidad en función de la distancia a la pared

Ley de Darcy

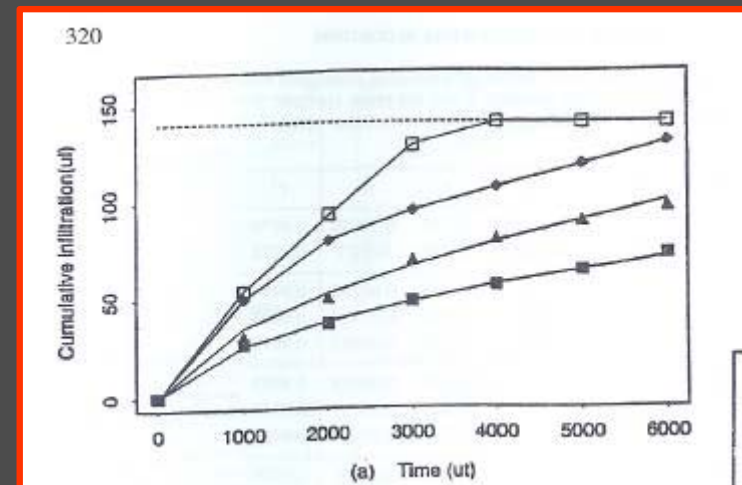
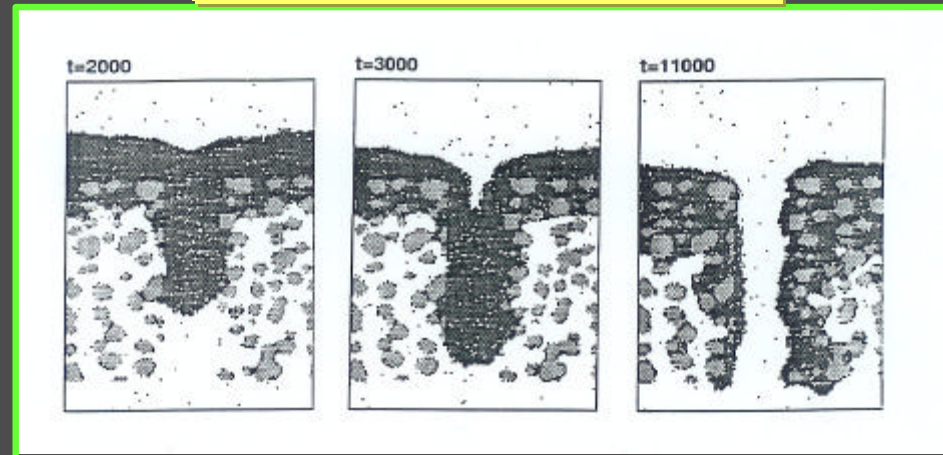


Infiltración en medio no saturado

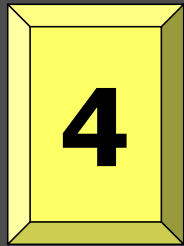
Medio poroso con una fisura plana



Secuencia de infiltración en un medio poroso



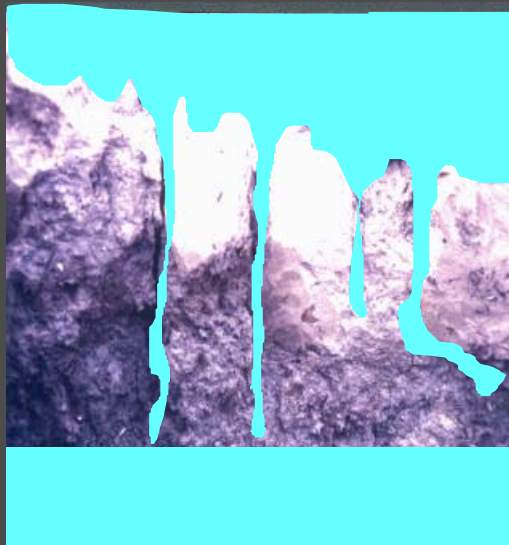
Infiltration acumulada en función del tiempo



Obtención de un modelo macroscópico de transferencia preferencial del agua en suelos



Flujo preferencial



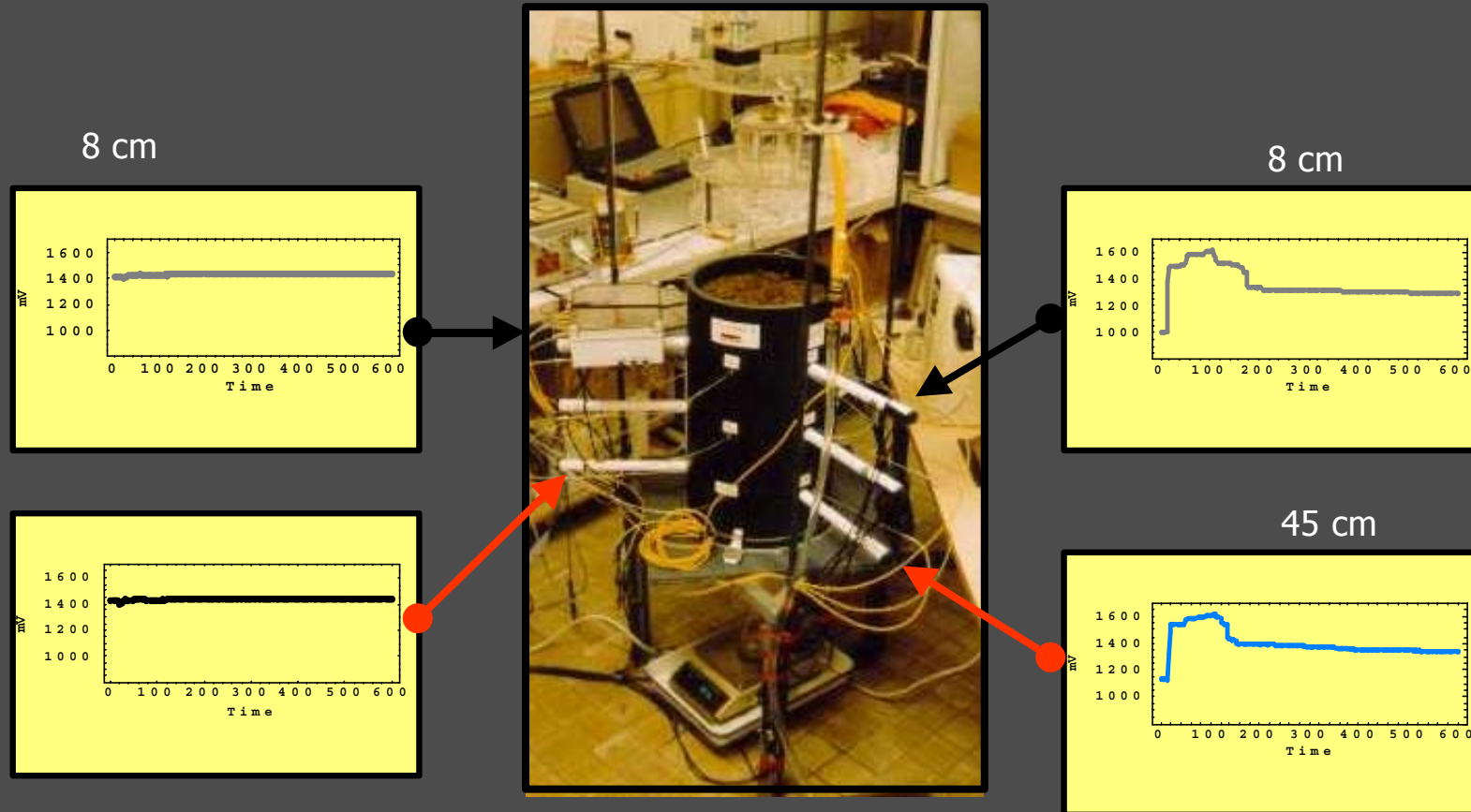
Objetivo: obtener un modelo simple de predicción de la transferencia preferencial del agua en los suelos



Estudios experimentales

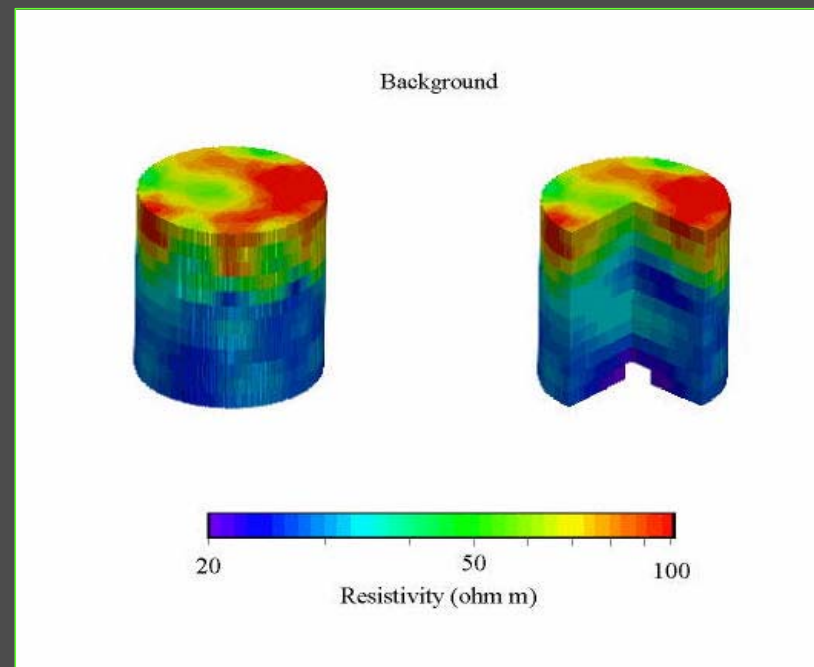
Water Content with Capacity Probes

Frente de infiltración heterogéneo
Dificultades de estimación con los
instrumentos clásicos



Tomografía eléctrica

Método
cualitativo



Las simulaciones numéricas con los modelos de gas en red

Analizar los mecanismos del flujo preferencial

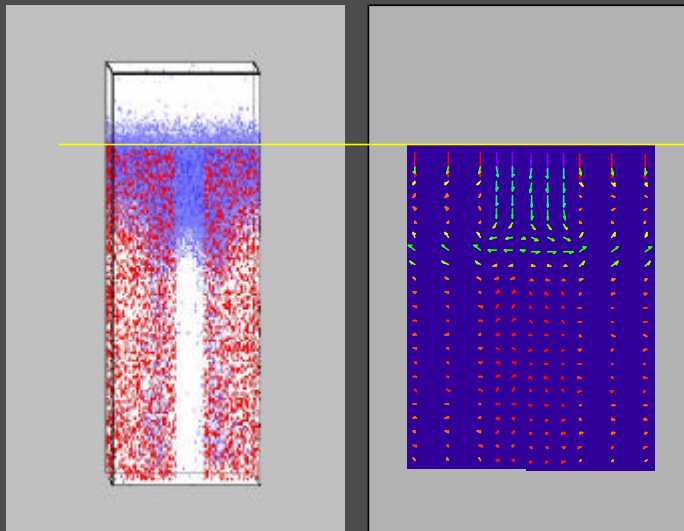
Caracterizar el campo de velocidades y los perfiles de humedad

Obtener relaciones entre flujo y estructura del medio poroso

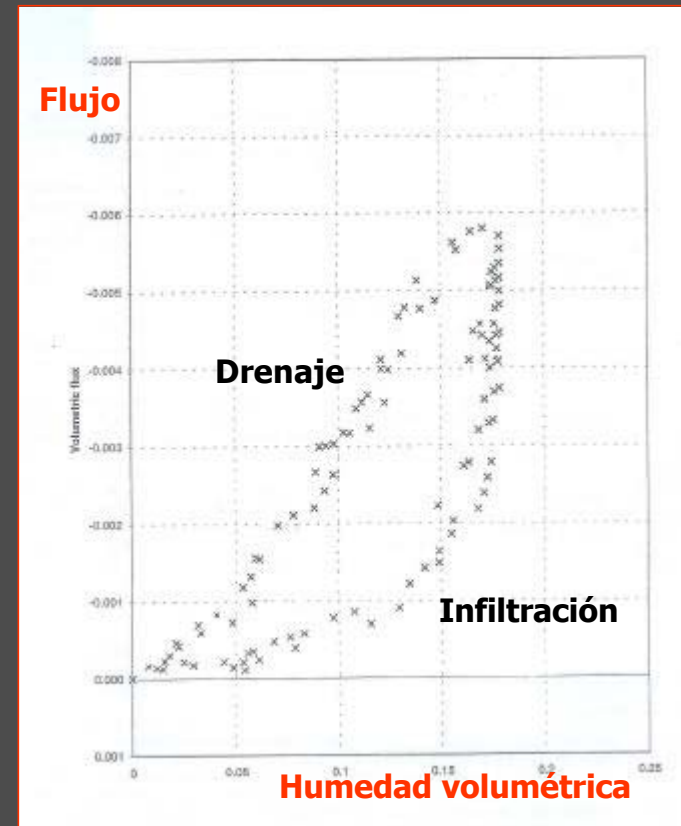
Formular leyes conceptuales y un modelo macroscópico de predicción del flujo preferencial



Relación flujo-humedad en los macroporos



$$u = b \theta^a - v \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

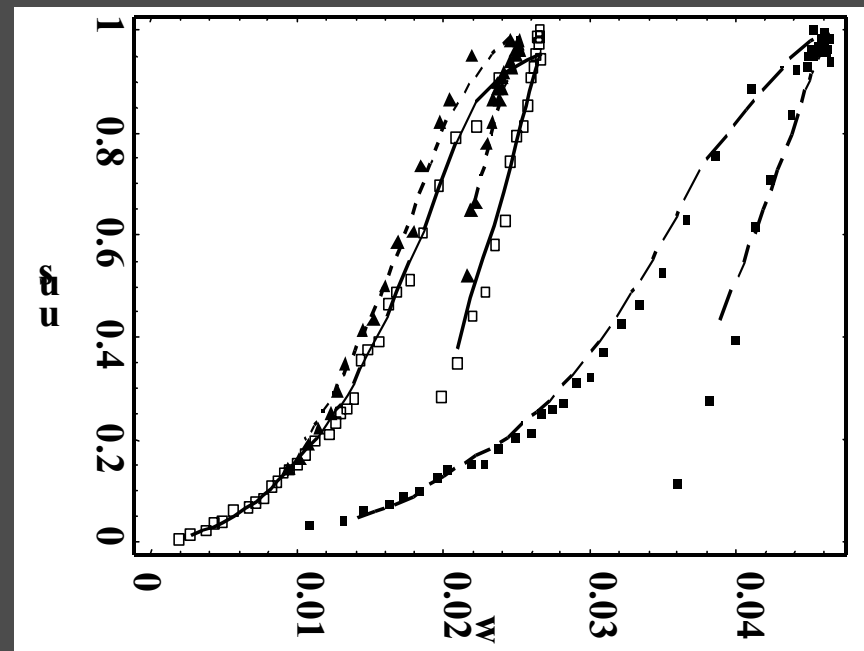


Relaciones constitutivas en los suelos



$$u = b \theta^a - v \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

La relación entre el flujo y la cantidad de agua en los macroporos presenta un ciclo de histéresis



Modelo KDW

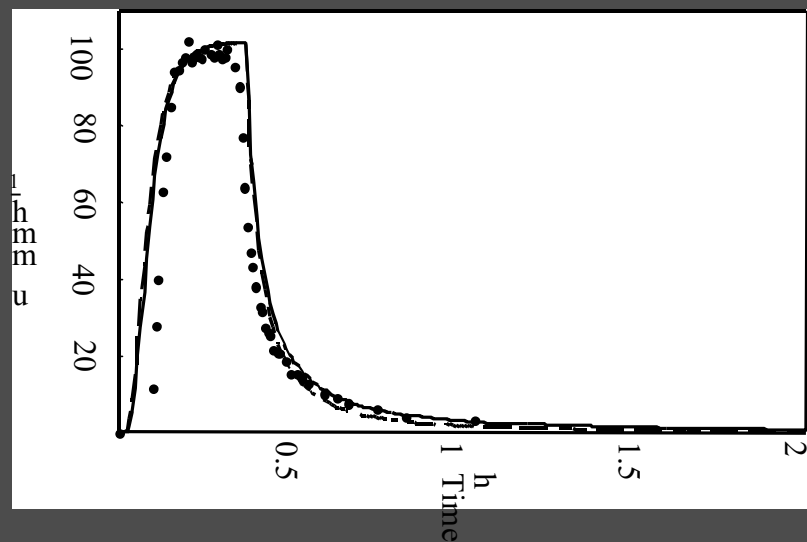
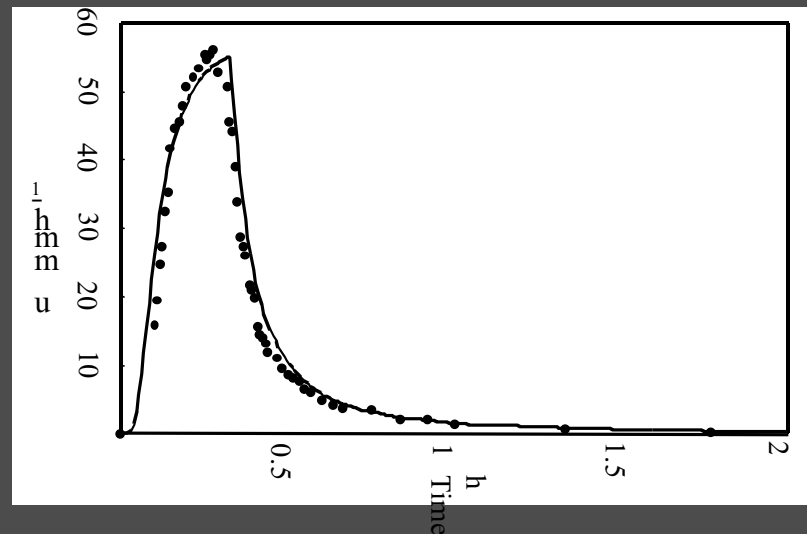
$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot u = 0$$

$$u = b \theta^a - v \frac{\partial \theta}{\partial t}$$



Modelo KDW

$$\frac{\partial u}{\partial t} + pu^q \frac{\partial u}{\partial z} = v \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$



Síntesis

Los gases en red son útiles para estudiar fenómenos que son difíciles de analizar experimentalmente

Limitaciones de escala de observación (prácticos a la escala de poros)

“Buen comportamiento” sólo para velocidades no muy elevadas

Modelos de Lattice Botzmann se adaptan mejor para problemas con muchos grados de libertad o a la escala macroscópica



Muchas gracias por vuestra atención

