

DISPERSIÓN DE UN TRAZADOR INERTE EN UN MEDIO POROSO SIMULADA CON EL MODELO DE MALLA BGK Y SU COMBINACIÓN CON EL MODELO DEL CAMINO ALEATORIO

F.J. Jiménez-Hornero¹, J.V. Giráldez² y A. Laguna³

¹ Dirección General de Investigación Agraria y Pesquera. Dpto. Suelos y Riegos CIFA "Alameda del Obispo". Córdoba. jihof@arrakis.es

² Departamento de Agronomía. E.T.S.I.A.M., Universidad de Córdoba. aglgicej@uco.es

³ Departamento de Física Aplicada. E.T.S.I.A.M., Universidad de Córdoba. fa11alua@uco.es

RESUMEN. La dispersión de un trazador inerte en un medio poroso es analizada mediante dos aproximaciones numéricas como alternativa a la difícil adaptación de soluciones analíticas para describir problemas complejos. La primera de ellas se basa en el modelo de malla BGK para describir las componentes advectiva y difusiva del flujo mientras que la segunda usa el campo de velocidades determinado por la primera, describiendo la difusión con el modelo del camino aleatorio. Los patrones de dispersión del trazador son obtenidos de forma sencilla con ambas alternativas, siendo los resultados similares. La aproximación BGK-camino aleatorio es más versátil que la que emplea únicamente el modelo BGK ya que no tiene limitación alguna en la simulación de la constante de difusión aunque tiene el inconveniente de una menor precisión como se demuestra al comparar sus resultados en la descripción de la dispersión de Taylor-Aris con la solución analítica.

ABSTRACT. Two approaches for studying the dispersion of a passive tracer in a porous medium are proposed as alternatives to the difficult use of analytic solutions. The first one consists of using the lattice BGK model to determine the advection and diffusion components of the flow, while the second also uses the lattice BGK model to calculate the velocity field of the flow but, unlike the former, it employs the random walk model to characterize the diffusion. Both alternatives permit, fairly easily when compared to the analytical solutions, the obtention of the dispersion pattern of the tracer, giving rise to similar results, although the versatility of the BGK-random walk model is greater than the BGK model alone, as there is no limitation whatever in the value of the diffusion constant it is wished to simulate, but at the same time this first approach is lesser accurate than the second one as it can be checked when the result of the simulation corresponding to the Taylor-Aris dispersion are compared with the analytic solution.

1. Introducción

Este trabajo presenta dos alternativas numéricas al uso de soluciones analíticas para describir la dispersión de un trazador inerte en medios porosos. Este tipo de medios se caracterizan por no ser homogéneos con presencia de agregados y grietas que dificultan la aplicación de una solución analítica siendo necesario el uso de modelos numéricos en la simulación del fenómeno antes mencionado. La primera de las alternativas analizadas está basada en el uso del modelo de malla BGK para describir las componentes advectiva y difusiva del flujo. Se trata de una evolución del modelo de malla de Boltzmann (LBM) que es un esquema numérico desarrollado fundamentalmente en la última década del s. XX con el propósito de simular la dinámica de los fluidos (Chen y Doolen, 1998; Wolf-Gladrow, 2000, §5). Este modelo describe un fenómeno a una escala mesoscópica en la que la realidad es transformada en un mundo sintético constituido por partículas simples que interactúan entre sí siguiendo unas reglas sencillas. La mayoría de los LBM están basados en los trabajos de Chen et al., (1992) y Qian et al., (1992) que consiguieron una simplificación del modelo usando el concepto de tiempo de relajación propuesto por Bathnagar et al. (1954) en el contexto de las colisiones de gases dando lugar al modelo de malla BGK.

Entre los fenómenos que han sido descritos con este modelo se encuentra el de la dispersión (Flekkøy 1993, Flekkøy et al., 1995; Zhang et al., 2002). Sin embargo, el uso del modelo BGK en el estudio de la dispersión está limitado por el hecho de que no siempre es posible simular la viscosidad cinemática y la constante de difusión deseadas, especialmente cuando se trata de valores pequeños. En el tipo de flujos objeto del presente trabajo, la simulación de la primera variable física antes aludida no presenta problema porque el número de Reynolds es pequeño. Sin embargo es frecuente tener que trabajar con valores de la constante de difusión que dan lugar a números de Péclet significativamente grandes, que no pueden ser simulados por la propia formulación del modelo BGK, a menos que se usen técnicas que dan lugar a errores en la descripción de la dispersión Flekkøy (1993).

Una solución para resolver el problema anterior es simular la componente difusiva del flujo con el modelo del

camino aleatorio. Este modelo ha sido usado con cierta frecuencia en la descripción del transporte de contaminantes en un medio poroso (Kinzelbach, 1988; Dagan, 1989; Dagan y Neuman, 1997).

La segunda alternativa que se propone en este trabajo para describir la dispersión se basa en combinar la componente advectiva del flujo determinada con el modelo de malla BGK con la componente difusiva calculada con el modelo del camino aleatorio de la misma forma que aparece expuesta en los trabajos de Maier et al. (1998, 2000).

El objetivo de este trabajo es mostrar y comparar los resultados que se obtienen con las dos aproximaciones expuestas en la simulación de la dispersión de un trazador inerte en un medio poroso para unas mismas condiciones de flujo.

2. Métodos

2.1. El modelo de malla BGK

El modelo de malla BGK es una evolución del modelo de malla de Boltzmann de cuya ecuación fundamental se puede derivar la ecuación de Navier-Stokes (Rothman y Zaleski, 1997, §6.3; Chen y Doolen, 1998; Chopard y Droz, 1998, §3.5; Wolf-Gladrow, 2000, §4.2). Además también es posible obtener la ecuación de difusión (Flekkøy, 1993), por lo que es una formulación válida para la simulación del fenómeno de la dispersión. El modelo de malla BGK está constituido por un conjunto de partículas simples que interactúan entre sí conservando la masa y la cantidad de movimiento (Rothman y Zaleski, 1997, §6.1; Chopard y Droz, 1998, §3.5). El dominio problema es una malla regular en la que cada nodo está unido a los que le rodean mediante una relación de vecindad que es elegida en función de complejidad del fenómeno que se quiere simular. Por ejemplo, en el caso de dos dimensiones, para describir la advección se usan ocho vecinos más el mismo nodo (modelo $d2q9$) mientras que para la difusión solo cuatro de los nodos vecinos son tenidos en cuenta (modelo $d2q4$). La Fig. 1 muestra el esquema de ambos modelos de vecindad.

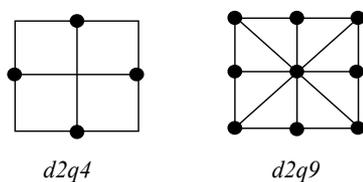


Fig. 1. Relaciones de vecindad usados en el modelo de malla BGK para describir la advección ($d2q9$) y la difusión ($d2q4$), con d el número de dimensiones y q el número de vecinos considerados.

La probabilidad de encontrar una partícula en un enlace cualquiera i que une un nodo con sus vecinos, está representada por las variables f_i , que varían de forma continua en el intervalo $[0,1]$ cumpliendo la hipótesis de

caos molecular de Boltzmann al ser independientes unas de otras. A partir de ellas se pueden determinar variables macroscópicas como la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ y la velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ de la forma:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \sum_{i=1}^q f_i(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\sum_{i=1}^q f_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{w}_i}{\rho(\mathbf{r}, t)} \end{aligned} \quad (1)$$

donde $\mathbf{w}_i = (\Delta r / \Delta t) \cdot \mathbf{c}_i$, es la velocidad de una partícula en el enlace i en el nodo \mathbf{r} en el tiempo t . Δr es el espaciado de la malla, \mathbf{c}_i son las coordenadas del nodo vecino conectado a \mathbf{r} mediante el enlace i y q el número de vecinos considerados.

La ecuación mesoscópica fundamental de un modelo BGK es (Qian et al., 1992; Chen et al., 1992):

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \frac{1}{\tau} f_i^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_i(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

en la que $f_i^{(0)}$ es el término de equilibrio local y τ es el tiempo de relajación, concepto propuesto por Bhatnagar, Gross y Krook (Bhatnagar et al., 1954), de cuyas iniciales se deriva el nombre del modelo BGK. La expresión usada en este trabajo para $f_i^{(0)}$ toma la forma general:

$$f_i^{(0)} = \rho t_p \left[1 + \frac{w_{i\beta} u_\beta}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i\beta} u_\beta}{c_s^2} \right)^2 - \frac{u_\beta u_\beta}{2c_s^2} \right] \quad (3)$$

donde el convenio de suma de Einstein ha sido adoptado y siendo k_β la componente de cualquier vector \mathbf{k} en la dimensión β . Los t_p son factores que ponderan, en el caso de una malla cuadrada bidimensional, a las partículas en reposo, t_0 , a las que se mueven en la horizontal y en la vertical, t_1 , y a las que lo hacen en la diagonal, t_2 . Finalmente, c_s es un parámetro conocido como velocidad del sonido que depende de la relación de vecindad seleccionada. La Tabla 1 muestra los valores de los parámetros anteriores para las mallas $d2q4$ y $d2q9$ (Succi, 2001, §5.2).

Tabla 1. Parámetros de las mallas $d2q4$ y $d2q9$. (Succi, 2001, §5.2).

| | t_0 | t_1 | t_2 | c_s^2 |
|--------|-------|-------|-------|---------|
| $d2q4$ | 0 | 1/4 | 0 | 1/2 |
| $d2q9$ | 4/9 | 1/9 | 1/36 | 1/3 |

En el caso de la difusión la expresión (3) puede ser simplificada (Rothman y Zaleski, 1997, §8.4, 8.5; Stockman, 1999), eliminando los términos no lineales en u , ya que la ecuación de difusión es lineal con respecto a la velocidad. La mayor simplicidad de esta ecuación comparada con la de Navier-Stokes permite el uso de la malla $d2q4$ en su descripción en vez de la más compleja $d2q9$ necesaria para simular la componente advectiva del flujo.

El tiempo de relajación posibilita ajustar de forma sencilla los dos parámetros que definen la dispersión: por un lado la viscosidad cinemática, ν , y por tanto el número de Reynolds, Re , y por otro la constante de difusión, D , que determina el número de Péclet, Pe . En (4) τ_ν y τ_D son los tiempos de relajación que ajustan la viscosidad cinemática y la constante de difusión, respectivamente, siendo c_{sv} y c_{sD} las velocidades del sonido de los modelos de vecindad seleccionados para describir la advección y la difusión.

$$\begin{aligned} \nu &= c_{sv}^2 \left(\tau_\nu - \frac{1}{2} \right) \\ D &= c_{sD}^2 \left(\tau_D - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

La estabilidad del modelo de malla BGK propuesto para describir las componentes advectiva y difusiva del flujo está condicionada a los valores de los respectivos tiempos de relajación ya que si alguno de ellos es menor que 0.5 la viscosidad cinemática y la constante de difusión serían negativas. Debido a que los flujos en medios porosos se caracterizan por un valor de Re pequeño, la componente advectiva no presenta problemas de inestabilidad. Sin embargo, la constante de difusión suele ser pequeña dando lugar a un valor de Pe grande que no hace posible la simulación de esta componente del flujo con el modelo de malla BGK. La solución que se propone en este trabajo para estos casos es simular la difusión con el modelo del camino aleatorio.

2.2. El modelo del camino aleatorio

Una alternativa para la simulación de cualquier valor de la constante de difusión, D , es la propuesta por autores como Kinzelbach (1988) o Dagan (1989), consistente en el uso del modelo del camino aleatorio. La trayectoria de una partícula de trazador inerte en un campo externo de velocidades puede ser definida como (Maier et al., 1998; 2000)

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(\mathbf{x}(t))\Delta t + \mathbf{x}_D(D\Delta t) \quad (5)$$

donde $\mathbf{x}(t + \Delta t)$ es la posición de esa partícula, t es el tiempo, $\mathbf{v}(\mathbf{x}(t))$, componente advectiva, es la velocidad interpolada a partir del campo de velocidades determinado con el modelo de malla BGK y $\mathbf{x}_D(D\Delta t)$ es la componente difusiva que se corresponde con un vector de módulo

constante e igual a \sqrt{d} , siendo d el número de dimensiones del problema analizado, y cuya orientación aleatoria es obtenida de una distribución normal de media cero y varianza $2D\Delta t$. Así en el caso plano ($d = 2$) se tiene:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_D^2(D\Delta t) &= 2dD\Delta t \Rightarrow \\ \mathbf{x}_D(D\Delta t) &= \sqrt{4D\Delta t} = 2\sqrt{D\Delta t} \end{aligned} \quad (6)$$

La componente difusiva tiene la expresión (6) debido a que, en un espacio de d dimensiones, la ecuación de difusión pura (7) tiene como solución la distribución normal (8), con varianza $\sigma^2 = 2Dt$.

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \nabla \cdot (D\nabla C) \quad (7)$$

$$C(\mathbf{x}, t) = (2\pi\sigma^2)^{-d/2} \exp\left(-\mathbf{x}^2 / (2\sigma^2)\right) \quad (8)$$

Cuando se considera que las partículas de trazador no interaccionan unas con otras y están suspendidas en un fluido portador homogéneo, las trayectorias descritas por las mismas son caminos aleatorios cuyas etapas son también sucesos aleatorios que permiten la aplicación del teorema central del límite siendo el desplazamiento medio:

$$\langle \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(t_0) \rangle = 0 \quad (9)$$

y el desplazamiento medio al cuadrado

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(t_0))^2 \rangle = 2D(t - t_0) \quad (10)$$

donde t_0 es el tiempo inicial y $\langle \rangle$ expresa la etapa media.

Cuando la advección y la difusión son consideradas, en vez de usar D se considera el coeficiente de dispersión D^* , que para una dirección x y un tiempo t se puede calcular como

$$D_x^*(t) = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_x^2}{dt} \quad (11)$$

donde

$$\sigma_x^2(t) = \sum_{i=1}^N (\Delta x_i - \langle \Delta x_i \rangle)^2 \quad (12)$$

con

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(t_0) \quad (13)$$

con $\mathbf{x}(t)$ la coordenada de cada partícula de trazador en la dirección x .

Si $\frac{d\sigma_x^2}{dt}$ es constante, la ley de Fick es válida para describir la dispersión.

La distancia Δr que separa dos nodos vecinos es la misma que se usa en el modelo de malla BGK para el cálculo del

campo de velocidades. La selección del valor de Δt debe estar basada en obtener un mínimo número de desplazamientos de partículas necesario para obtener resultados de precisión sin que el tiempo de ejecución sea excesivo. En general, el valor de Δt se determina mediante la expresión (Maier et al., 2000):

$$v_{\max} \Delta t + 2\sqrt{D\Delta t} \leq \Delta r/2 \quad (14)$$

en la que v_{\max} es el máximo valor del campo de velocidades. Con esta elección se asegura que la máxima distancia recorrida en cualquier caso sea la mitad del espaciado entre dos nodos.

Otro importante aspecto a tener en cuenta es la interacción entre las partículas y los lugares del dominio definidos como sólidos. Aunque en algunos casos la regla del rebote es aplicada, se ha comprobado que puede producir una acumulación o disminución del número de partículas en los alrededores de los sólidos dependiendo del valor seleccionado para Δt . La regla propuesta por Salles et al. (1993) se adopta en este trabajo de forma que si una partícula encuentra un contorno sólido se para y se sitúa sobre el mismo, partiendo en la siguiente iteración de esta posición siguiendo una dirección aleatoria.

El incremento del número de partículas de trazador mejora la precisión del modelo como se demostró por Maier et al. (1998), aunque deben tenerse en cuenta el incremento de los requerimientos de cálculo que supone un elevado número de partículas.

3. Resultados

El paso previo a la simulación de la dispersión de un trazador inerte en un medio poroso fue la generación de este último. Para ello se empleó el procedimiento expuesto por Rappoldt y Crawford (1999) basado en el uso de una malla fractal aleatoria en la que con una probabilidad $p = 0.7$ una celda es considerada como matriz del suelo, dando lugar a una porosidad $\varepsilon = 0.76$ calculada con (15),

$$\varepsilon = 1 - p^k \quad (15)$$

donde k es el número de niveles de recursión que en el caso que se expone fue 4. La longitud y ancho del dominio fueron $nx = ny = 156$ unidades de malla (u.m.), aunque las primeras 50 columnas se consideraron libres de obstáculos con el objetivo de que el flujo estuviera bien establecido antes de encontrarse con el medio poroso (Figs. 2 y 3).

3.1. Simulación correspondiente al modelo de malla BGK.

El campo de velocidades fue calculado con el modelo de malla BGK usando la relación de vecindad $d2q9$, forzando el flujo de izquierda a derecha con una velocidad media $U = 0.0212$ u.m./iteración, siendo la viscosidad $\nu = 0.0833$ u.m.²/iteración ($\tau_\nu = 0.75$). La componente difusiva del

flujo fue determinada con la relación de vecindad $d2q4$ simulando una constante de difusión $D = 0.030$ u.m.²/iteración ($\tau_D = 0.56$). Los números de Reynolds y de Péclet fueron 39.70 y 110.24, respectivamente, considerando como longitud característica del flujo el ancho del dominio. Todo el trazador fue inicialmente situado entre las columnas 28 y 32 con una concentración igual a 10.0 unidades. Tanto en la dirección del flujo como en la perpendicular a la anterior se aplicaron condiciones periódicas evitando que el trazador que salía por el margen derecho del dominio entrase por el izquierdo manteniendo la columna $nx = 156$ a una concentración constante e igual a cero.

La Fig. 2 muestra la evolución de la distribución de la concentración normalizada de trazador con respecto a su valor inicial, correspondiendo los tonos oscuros y claros a zonas con más y menos concentración de trazador, respectivamente. El número que aparece en cada gráfico representa el número de iteraciones calculadas. El trazador permanece durante más tiempo en aquellos lugares donde la estructura del suelo más dificulta su paso.

3.2. Simulación con el modelo BGK-camino aleatorio.

En este caso se simuló la dispersión de un trazador inerte, compuesto por 9000 partículas inicialmente situadas entre las columnas 28 y 32, en el mismo medio poroso descrito en el apartado anterior con el mismo campo de velocidades y constante de difusión. De igual forma se mantuvo la concentración constante e igual a cero en $nx = 156$ y se usaron condiciones periódicas en la dirección del flujo y en la perpendicular a la misma. La Fig. 3 muestra la evolución temporal de la concentración de trazador normalizada con respecto a la inicial, representando los tonos oscuros un mayor valor de la misma y los claros uno menor.

Las Figs. 2 y 3 son similares aunque en la última puede observarse como el trazador permanece más tiempo en las zonas donde es más difícil su dispersión debido a la complejidad de la estructura del medio poroso sintético generado.

3.3. Comparación entre las dos alternativas

Los resultados obtenidos en la descripción de la evolución temporal la dispersión de un trazador inerte en el medio poroso propuesto son parecidos para los dos modelos presentados. Sin embargo, esto es una apreciación cualitativa y es necesario determinar de forma más precisa la posible diferencia entre las aproximaciones BGK y BGK-camino aleatorio. Con este fin se calcularon las curvas de ruptura para ambas alternativas, obteniendo la cantidad de trazador C , normalizada con respecto a su concentración inicial C_0 , que había pasado por $L = 155$ u.m. en el tiempo normalizado $T = t \cdot U/L$ en el que t es el tiempo y U es la velocidad media del flujo. Como se muestra en la Fig. 4 la curva de ruptura del modelo BGK-camino aleatorio está retrasada con respecto a la del modelo de malla BGK.

La diferencia observada en la Fig. 4 plantea la cuestión de cual de las dos alternativas es más exacta. Para disponer de una solución exacta se simuló la dispersión según Taylor-Aris (Taylor, 1953; Aris, 1956; Perea-Reeves y Stockman, 1997; Stockman, 1999). Si un trazador se dispersa entre dos placas paralelas e infinitas separadas ny , después de un tiempo característico $t_c = ny^2/D$, la proyección de la concentración de trazador sobre el eje paralelo a la dirección del flujo puede ser aproximada a una distribución normal con $\sigma^2 = D^* \cdot t$, siendo D^* el coeficiente de dispersión longitudinal que se puede calcular en función del número de Péclet con la expresión (16).

$$\frac{D^*}{D} = 1 + \frac{Pe^2}{210} \quad (16)$$

Las simulaciones fueron hechas considerando un dominio problema de $nx = 3200$ u.m. de longitud, estando las placas separadas una distancia $ny = 30$ u.m. La viscosidad del fluido portador fue 0.25 u.m.²/iteración y la constante de difusión y la velocidad media del flujo fueron 0.25 u.m.²/iteración y 0.0742 u.m./iteración, respectivamente. El valor de los números de Reynolds y de Péclet, considerando como longitud característica del flujo la separación entre las placas, fue igual a 8.904 . Finalmente el tiempo característico para el que se alcanzaban las condiciones de dispersión de Taylor-Aris fue $t_c = 3600$ iteraciones. En el caso del modelo BGK-camino aleatorio se consideró que el trazador estaba compuesto por 3600 partículas. La razón D^*/D se calculó aplicando (11) a las curvas $(\sigma^2 - t)$, mostradas en la Fig. 5 para posteriormente compararla con el valor teórico (16) que fue 1.37753 . El modelo de malla BGK dio un valor para esta razón de 1.40364 y la alternativa BGK-camino aleatorio 1.41026 , siendo el error del 1.860% y 2.376% , respectivamente.

Las curvas de ruptura de ambos modelos fueron calculadas para $L = 3199$ u.m., comparándolas con la solución teórica aproximada (17), (e.g. van Genuchten y Alves, 1982, A1; Kutílek y Nielsen, 1994 §9.3.3), Fig. 6 y 7,

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - U \cdot T}{2 \cdot (D^* \cdot T)^{1/2}} \right] \quad (17)$$

donde x es la distancia a la concentración media y erf es la función de error. La bondad del ajuste de las curvas de ruptura experimentales a la teórica fue determinada usando tres métodos (Legates y McCabe, 1999): el coeficiente de determinación R^2 (18), el coeficiente de eficiencia E (19) y el índice de acuerdo d (20). En todas las expresiones anteriores, N es el número de pares de valores, cada uno compuesto por un valor simulado P y otro teórico O . La sobre barra indica valores medios. Los resultados de la Tabla 2 muestran como el modelo de malla BGK es más exacto que el modelo BGK-camino aleatorio en la simulación de la dispersión de Taylor-Aris.

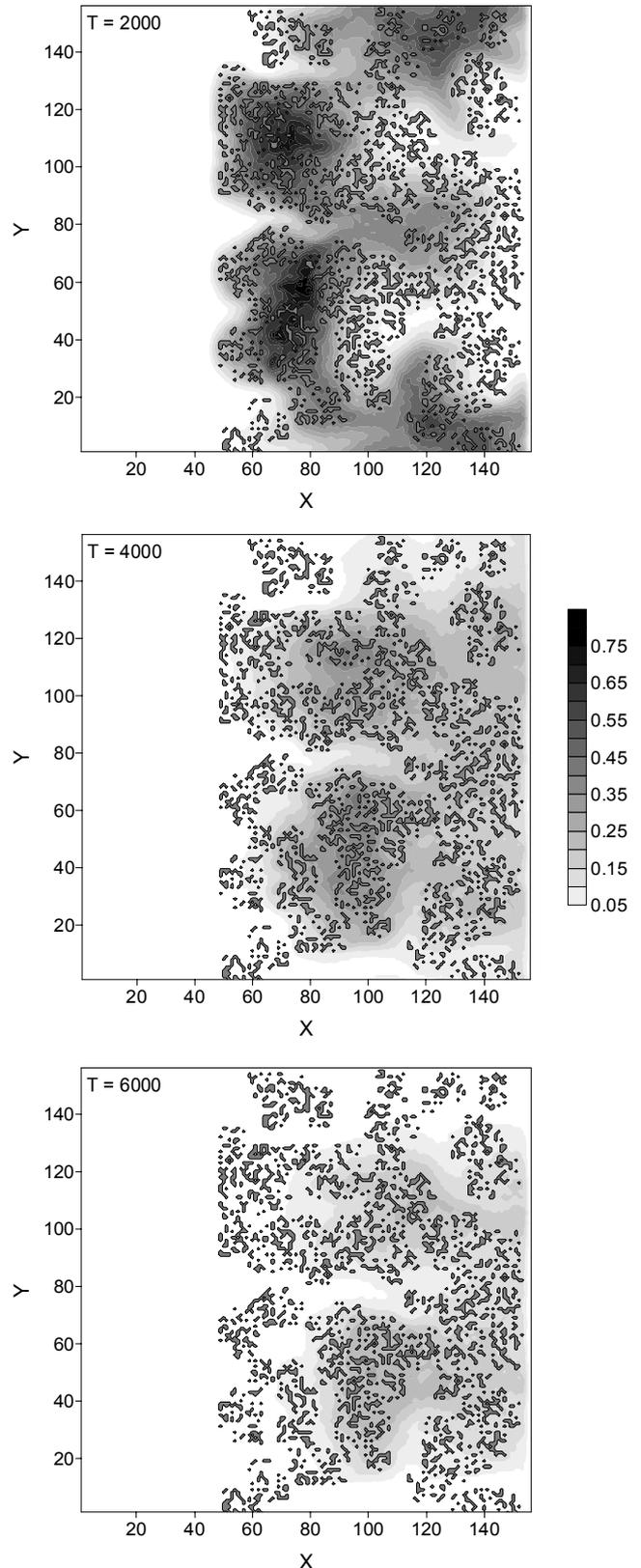


Fig. 2. Dispersión de un trazador inerte en un medio con porosidad $\varepsilon = 0.76$, simulada con el modelo de malla BGK. El flujo fue forzado de izquierda a derecha con $Re = 39.70$ y $Pe = 110.24$. Los tonos oscuros y claros se corresponden con zonas de mayor y menor concentración de trazador, normalizada respecto a su valor inicial. El número de cada figura indica el número de iteraciones calculadas.

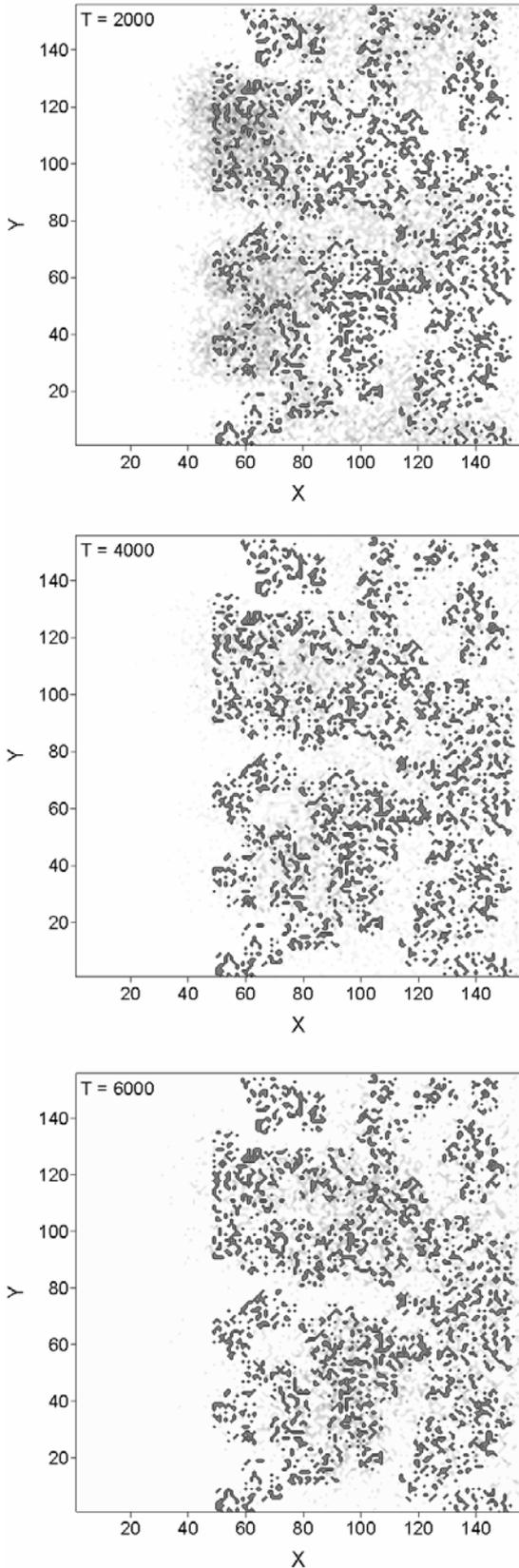


Fig. 3. Dispersión de un trazador inerte en un medio con porosidad $\varepsilon = 0.76$, simulada con el modelo BGK-camino aleatorio. El flujo fue forzado de izquierda a derecha con $Re = 39.70$ y $Pe = 110.24$. Los tonos oscuros y claros se corresponden con zonas de mayor y menor concentración de trazador, normalizada respecto a su valor inicial. El número de cada figura indica el número de iteraciones calculadas.

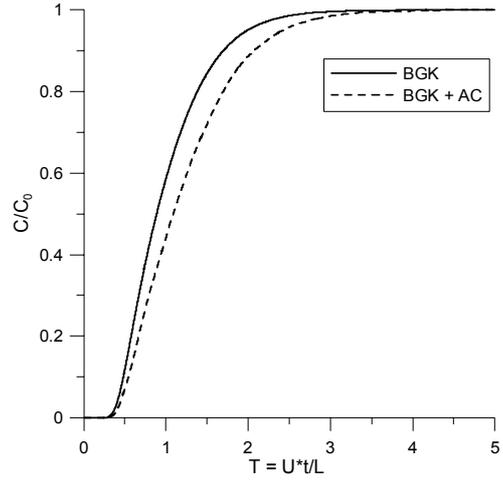


Fig. 4. Curvas de ruptura obtenidas con los modelos de malla BGK (línea continua) y BGK-camino aleatorio (línea discontinua) en la simulación de la dispersión de un trazador inerte en un medio con porosidad $\varepsilon = 0.76$, en el caso de un flujo con $Re = 39.70$ y $Pe = 110.24$.

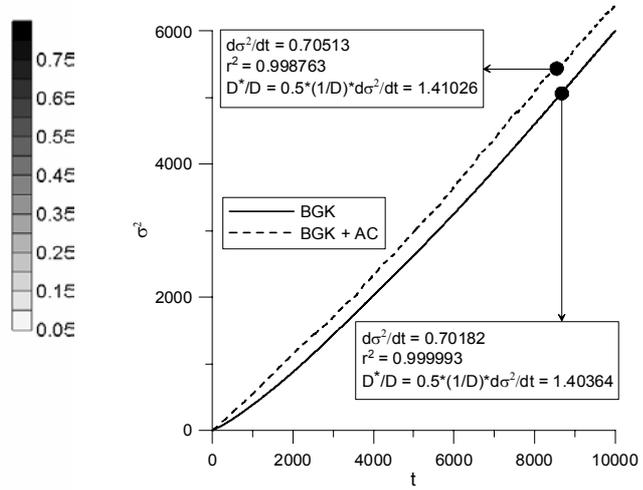


Fig. 5. Curvas de $(\sigma^2 - t)$ obtenidas con los modelos de malla BGK (línea continua) y BGK-camino aleatorio (línea discontinua) simulando la dispersión de Taylor-Aris para un flujo con $Re = Pe = 8.904$. El tramo final de cada curva puede ajustarse a los valores de $d\sigma^2/dt$ mostrados.

$$R^2 = \left\{ \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})}{\left[\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2 \right]^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2 \right]^{0.5}} \right\}^2; \quad (18)$$

$$R^2 \in [0, 1]$$

$$E = 1.0 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}; \quad E \in (-\infty, 1] \quad (19)$$

$$d = 1.0 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|P_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2}; d \in [0,1] \quad (20)$$

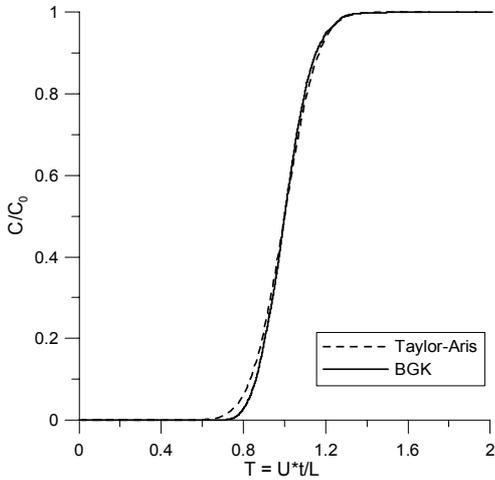


Fig. 6. Curva de ruptura obtenida con el modelo de malla BGK (línea continua) simulando la dispersión de Taylor-Aris para un trazador inerte en un flujo de $Re = Pe = 8.904$, comparada con la teórica aproximada (línea discontinua).

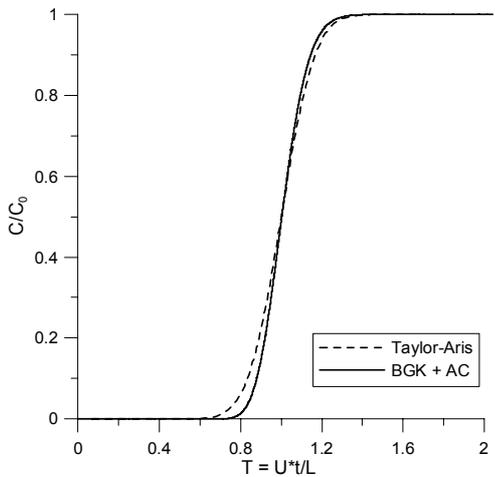


Fig. 7. Curva de ruptura obtenida con el modelo BGK-camino aleatorio (línea continua) simulando la dispersión de Taylor-Aris para un trazador inerte en un flujo de $Re = Pe = 8.904$, comparada con la teórica aproximada (línea discontinua).

Tabla 2. Coeficientes de determinación R^2 , de eficiencia E e índice de acuerdo d , obtenidos del ajuste de las curvas de ruptura de los modelos de malla BGK y BGK-camino aleatorio a la teórica de la dispersión de Taylor-Aris.

| | BGK | BGK-camino aleatorio |
|-------|--------|----------------------|
| R^2 | 0.9993 | 0.9981 |
| E | 0.9992 | 0.9977 |
| d | 0.9998 | 0.9994 |

4. Conclusiones

En este trabajo se ha presentado el modelo de malla BGK y la combinación BGK-camino aleatorio como alternativas a las complejas soluciones analíticas que describen la dispersión de un trazador inerte en un medio poroso. La primera de ellas es más exacta que la segunda como demuestran las simulaciones correspondientes a las simulaciones de la dispersión de Taylor-Aris. Dos son las causas de este hecho: en primer lugar en la componente advectiva del modelo BGK-camino aleatorio, la velocidad en cada punto es interpolada a partir del campo de velocidades determinado con el modelo BGK; en segundo lugar, la precisión en la simulación de la componente difusiva es altamente dependiente del número de partículas de trazador consideradas. Mientras, en el modelo de malla BGK solo hay una causa de error de importancia que es la aplicación de la regla del rebote en la interacción de las partículas del fluido portador y de las partículas trazadoras con los obstáculos. Sin embargo, cuando no es necesaria una gran precisión en los resultados, es aconsejable usar la alternativa BGK-camino aleatorio por dos motivos: el primero es la mayor sencillez de codificación de la componente difusiva frente a la necesidad de uso de la programación en paralelo del modelo de malla BGK. El segundo y más importante es la ausencia de limitación en la simulación de cualquier valor de la constante de difusión frente a la imposibilidad de considerar valores pequeños de la misma que se correspondan con tiempos de relajación inferiores a 0.5 en el modelo de malla BGK.

Agradecimientos. Jiménez-Hornero, F.J. quiere agradecer el soporte económico prestado por la Dirección General de Investigación Agraria y Pesquera de la Junta de Andalucía a través de su Programa de Becas Posdoctorales.

Referencias

Aris, R. 1956. On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Proc. Royal Soc. A*, 235, 67-77.

Bathnagar, P., Gross, E.P. y Krook, M.K. 1954. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev. B*, 94, 511-525.

Chen, S. y Doolen, G. 1998. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 30, 329-364.

Chen, S., Wang, Z., Shan, X. y Doolen, G. 1992. Lattice Boltzmann computational fluid dynamics in three dimensions. *J. Stat. Phys.*, 68, 379-400.

Chopard, B. y Droz, M. 1998. *Cellular Automata modeling of physical systems*. Cambridge University Press, Cambridge.

Dagan, G. 1989. *Flow and transport in porous formations*. Springer-Verlag, New York.

Dagan, G. y Neuman, S. P. (Eds.) 1997. *Subsurface Flow and Transport. A Stochastic Approach*. Cambridge University Press, New York.

Flekkoy E.G. 1993. Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids. *Phys. Rev. E*, 47, 4247-4257.

Flekkoy E.G., Oxaal, U., Feder, J. y Jøssang, T. 1995. Hydrodynamic dispersion at stagnation points: Simulations and experiments. *Phys. Rev. E*, 52, 4952-4962.

Kutilek, M. y Nielsen, D.R. 1994. *Soil Hydrology*. Catena Verlag, Cremlingen-Destedt.

Kinzelbach, W. 1988. The random walk method in pollutant transport simulation. In: *Groundwater Flow and Quality Modelling*, (eds E.

- Custodio, A. Gurgui, & J. P. Lobo Ferreria) NATO ASI Ser., *Ser. C Math and Phys. Sci.*, 224, 227-246. D. Reidel, Norwell, Mass.
- Legates, D.R. y McCabe, G.J. 1999. Evaluating the use of "goodness-of-fit" measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. *Water Res. Research*, 1, 233-241.
- Maier, R.S., Kroll, D.M., Davis, H.T. y Bernard, R.S. 1998. Pore-scale flow and dispersion. *Int. J. Modern Phys. C*, 9, 1523-1533.
- Maier, R.S., Kroll, D.M., Bernard, R.S., Howington, S.E., Peters, J.F. y Davis, H.T. 2000. Pore-scale simulation of dispersion. *Phys. Fluids*, 12, 2065-2079.
- Perea-Reeves, S.J. y Stockman, H.W. 1997. A lattice-gas study of dispersion in alveolated channels. *Chem. Eng. Sci.*, 19, 3277-3286.
- Qian, Y.H., D'Humieres, D. y Lallemand, P. 1992. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys. Lett.*, 17, 479-484.
- Rappoldt, C. y Crawford, J.W. 1999. The distribution of anoxic volume in a fractal model of soil. *Geoderma*, 88, 329-347.
- Rothman, D.H. y Zaleski, S. 1997. *Lattice-gas cellular automata. Simple models of complex hydrodynamics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Salles, J., Thovert, J.F., Delannay, R., Prevors, L., Auriault, J.L. y Adler, P.M. 1993. Taylor dispersion in porous media. Determination of the dispersion tensor. *Phys. Fluids A*, 5, 2348-2376.
- Stockman, H.W. 1999. *A 3D Lattice Boltzmann code for modeling flow and multi-component dispersion*. Technical Report SAND99-0162, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico, USA.
- Succi, S. 2001. *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Numerical mathematics and scientific computation*. Oxford University Press, Oxford.
- Taylor, G. 1953. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. Roy. Soc. A*, 219, 186-203.
- van Genuchten, M.Th. y Alves, W.J. 1982. *Analytical solutions of the one dimensional convective dispersive solute transport equation*. USDA Tech. Bull. 1661. Washington.
- Wolf-Gladrow, D.A. 2000. *Lattice-gas automata and lattice Boltzmann models*. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin.
- Zhang, X., Bengough, A.G., Crawford, J. W. y Young, I.M. 2002. A lattice BGK model for advection and anisotropic dispersion equation. *Adv. Water Resour.*, 25, 1-8.