

**UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA**

**DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS**



**TESIS DOCTORAL**

**SIMULACIÓN DE ECUACIONES DE REACCIÓN-DIFUSIÓN  
MEDIANTE AUTÓMATAS DE GAS RETICULAR:  
APLICACIÓN A VERTIDOS COSTEROS**

**GUADALUPE DEL MAR VILLAGARCÍA ÚBEDA**

Las Palmas de Gran Canaria, Febrero de 1997

29/1996-97

**UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA  
UNIDAD DE TERCER CICLO Y POSTGRADO**

Reunido el día de la fecha, el Tribunal nombrado por el Excmo. Sr. Rector Magfco. de esta Universidad, el/a aspirante expuso esta **TESIS DOCTORAL**.

Terminada la lectura y contestadas por el/a Doctorando/a las objeciones formuladas por los señores miembros del Tribunal, éste calificó dicho trabajo con la nota de APPO CUM LAUDE POR UNANIMIDAD. Las Palmas de Gran Canaria a 4 de Abril de 1997.

El/a Presidente/a: Dr. D/ Juan Luis Romero Romero,

El/a Secretario/a: Dra. Dña. Isabel Padilla León,

El/a Vocal: Dra. Dña. Esther Pérez Martell,

El/a Vocal: Dr. D. Luis Álvarez León,

El/a Vocal: Dr. D. José Ramírez Labrador,

El/a Doctorando/a: D<sup>a</sup>. M<sup>a</sup> Guadalupe del Mar Villargarcía  
Ubeda,

---



<b>BIBLIOTECA UNIVERSITARIA</b>	
LAS PALMAS DE G. CANARIA	
N.º Documento	<u>321.987</u>
N.º Copia	<u>405.009</u>

UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS



SIMULACIÓN DE ECUACIONES DE REACCIÓN-DIFUSIÓN  
MEDIANTE AUTÓMATAS DE GAS RETICULAR:  
APLICACIÓN A VERTIDOS COSTEROS

Memoria presentada por la Licenciada D. M. GUADALUPE  
DEL MAR VILLAGARCÍA ÚBEDA para optar al grado de Doc-  
tora en Ciencias del Mar. Dirigida por el Dr. D. JOSÉ MIGUEL  
PACHECO CASTELAO.

El Director

La Candidata

Las Palmas de Gran Canaria, Febrero de 1997

JOSE MIGUEL PACHECO CASTELAO, Catedrático de Universidad del Área de Matemática Aplicada del Departamento de Matemáticas de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria,

**CERTIFICA:** Que la presente memoria titulada **Simulación de ecuaciones de reacción-difusión mediante autómatas de gas reticular: Aplicación a vertidos costeros** ha sido realizada bajo mi dirección por la Licenciada en Ciencias del Mar Doña M. Guadalupe del Mar Villagarcía Úbeda, y constituye su Tesis para optar al grado de Doctora en Ciencias del Mar.

Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente y a los efectos oportunos, firmo la presente en Las Palmas de Gran Canaria, a cinco de Febrero de mil novecientos noventa y siete.

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi director de tesis, José Miguel Pacheco Castela, por haber depositado su confianza en mi en todo momento y por encima de cualquier circunstancia. El me ha enseñado a ver la sencillez de la complejidad y a confiar en mis criterios.

También tengo un recuerdo muy afectuoso para quienes sin conocerme, me enseñaron todo lo que fui capaz de aprender sobre autómatas celulares; ellos son el grupo de trabajo de Autómatas Celulares del Servicio de Química-Física de la Universidad Libre de Bruselas, quienes me acogieron e hicieron mi estancia inolvidable en Bélgica. En especial quiero dar las gracias al director del grupo, Jean-Pierre Boon, y a mi eterno asesor y amigo tanto en directo como por correo electrónico, Alberto Suárez.

Al grupo de Análisis Matemático de Imágenes del Departamento de Informática y Sistemas de la Facultad de Informática, en especial a Agustín Trujillo y a Julio Esclarín, por su ayuda y asesoramiento en la introducción en mis simulaciones del programa XMW desarrollado por el grupo de investigación al que pertenecen.

A Ana Antoranz, profesora de Contaminación Marina de la Facultad de Ciencias del Mar y perteneciente al Departamento de Física de esta Universidad, sin cuya ayuda y estímulo no hubiera podido desarrollar la parte de esta tesis relacionada con vertidos contaminantes.

A Teresa Moreno, por ser una gran amiga y compañera y apoyarme tanto mental, mecánica como logísticamente.

Al grupo encargado de los sistemas informáticos del Departamento de Matemáticas, Rodri, Juan Ignacio y Eduardo, sin cuya ayuda jamás hubiera podido implementar el modelo desarrollado.

A Lucía Curquejo, por estar siempre en su sitio para asistirme con toda la burocracia propia de un doctorado y posterior tesis; gracias también por estar siempre ahí, en todos los altibajos del devenir de una tesis.

A Angelo, Frank, Pedro, Pino y demás compañeros del Departamento de Matemáticas que me han alentado y ayudado con sus consejos para llevar a buen término esta tesis.

A mis padres y hermanos, por su apoyo y confianza.

## RESUMEN

El transporte mecánico de un contaminante orgánico pasivo no conservativo vertido al mar es el resultado de la advección—realizada por la corriente reinante en el fluido en el que el contaminante es vertido—, la reacción, que comúnmente se representa por la degradación bacteriana y del proceso de difusión turbulenta. Los métodos más frecuentemente usados para calcular el impacto que el vertido tiene con el tiempo en zonas costeras de recreo adyacentes se basan en la aproximación numérica de modelos de flujo bidimensionales promediados en profundidad y en modelos de dispersión de 3 dimensiones cuasi-aleatorios.

En este trabajo se propone un modelo alternativo usando un tipo de celular automático, conocido como modelo de gas reticular de Boltzmann, para simular y reproducir la dispersión de contaminante vertido directamente en la superficie del mar. Este fenómeno se modeliza mediante una ecuación en derivadas parciales de reacción-difusión cuya solución (cuando se puede hallar) representa la evolución del vertido en el mar; varios autores han mostrado la posibilidad de usar autómatas celulares para reproducir la advección, reacción y difusión en diversos sistemas, pero nunca se ha intentado o realizado para el caso de un vertido de contaminante.

Para este estudio se han realizado los siguientes pasos:

a) Búsqueda y adecuación de un autómata de gas reticular para modelizar la ecuación de reacción-difusión pertinente.

b) Diseño de los diferentes operadores que se usarán para simular la dispersión de un contaminante en el medio marino.

c) Implementación del autómata realizando la construcción de programas en C, usando además el programa en X-Windows XMW para poder representar simultáneamente las imágenes de la evolución del proceso.

d) A partir de datos reales, simulación del fenómeno en una estación de trabajo Apollo de HP y comparación de los resultados con los obtenidos con un programa estandarizado de simulación de vertidos contaminantes (CORMIX).

# Índice

<b>1</b>	<b>Contaminación Marina y Automatas: Estado de la cuestión</b>	<b>1</b>
1.1	Introducción a la contaminación en la costa . . . . .	1
1.1.1	Evolución en el control de vertidos al mar en Gran Canaria	3
1.1.2	Modelización de los procesos físicos en la franja costera .	7
1.1.3	Mezcla del vertido con el agua medioambiental marina .	11
1.1.4	Estimación del campo de concentración del contaminante	12
1.2	Teoría de automatas . . . . .	17
1.2.1	Introducción . . . . .	17
1.2.2	Automatas Celulares . . . . .	21
1.3	Modelización de la contaminación marina . . . . .	31
1.3.1	Modelización tradicional de vertidos de residuos al mar .	31
1.3.2	Modelización Propuesta . . . . .	34
1.3.3	Un modelo matemático tradicional . . . . .	37
1.3.4	Un modelo matemático alternativo . . . . .	41
<b>2</b>	<b>Introducción a los modelos de automatas celulares en hidrodinámica:</b>	
	<b>Gases reticulares</b>	<b>45</b>
2.1	Teoría general de automatas para fluidos ideales . . . . .	45
2.2	Modelos de gas reticular en fluidos simples . . . . .	51
2.3	Descripción de un automata de gas reticular . . . . .	54

2.4	Propiedades generales de los AGR . . . . .	56
2.5	Reglas de evolución de un AGR . . . . .	61
2.6	Dinámica Microscópica . . . . .	64
2.6.1	Ecuaciones Booleanas . . . . .	65
2.6.2	Ecuación de Liouville . . . . .	70
2.6.3	Las cantidades medias . . . . .	71
2.6.4	Soluciones en el equilibrio . . . . .	73
2.6.5	Ecuación de Boltzmann sobre la reticula . . . . .	75
<b>3</b>	<b>Modelización del vertido de un contaminante mediante un</b>	
	<b>autómata de gas reticular</b> . . . . .	<b>84</b>
3.1	Ecuación Reticular de Boltzmann: Usos e Implementación . . . . .	84
3.2	Retícula de Boltzmann para la ecuación de reacción-difusión . . . . .	90
3.3	Modelo de difusión en un gas reticular mediante la aproximación de Boltzmann . . . . .	91
3.4	Ecuación de difusión sobre la retícula . . . . .	95
3.4.1	Relación entre la difusión para los medios continuos y para la retícula . . . . .	96
3.4.2	Control del coeficiente de difusión . . . . .	96
3.4.3	Los procedimientos de redistribución . . . . .	97
3.4.4	Los procedimientos de propagación . . . . .	99
3.4.5	Condiciones de contorno . . . . .	100
3.5	Reacción en la retícula . . . . .	101
3.6	Modelo de reacción-difusión en un gas reticular mediante Boltz- mann . . . . .	104
3.7	Simulación del modelo de gas reticular de un vertido de con- taminante . . . . .	108
3.7.1	Introducción . . . . .	108

3.7.2	Etapas del proceso . . . . .	109
<b>4</b>	<b>Resultados experimentales</b>	<b>118</b>
4.1	Catálogo de información disponible . . . . .	118
4.2	Casos simulados . . . . .	123
4.3	Un método estandarizado: Cormix3 . . . . .	136
4.4	Comparación de resultados . . . . .	137
<b>5</b>	<b>Conclusiones y futuro</b>	<b>140</b>
5.1	Conclusiones . . . . .	140
5.2	Direcciones futuras . . . . .	141

# Capítulo 1

## Contaminación Marina y Autómatas: Estado de la cuestión

### 1.1 Introducción a la contaminación en la costa

Se entiende por contaminación marina la introducción realizada por el hombre, directa ó indirectamente, de sustancias ó energía en el medio marino (incluyendo los estuarios) produciendo efectos negativos, como por ejemplo dañar los recursos vivos, impedir las actividades marinas como la pesca y degradar la calidad del agua del mar.

La huella del hombre es apreciable en todas las partes del océano, si bien el llamado mar abierto o las zonas de grandes profundidades oceánicas no sufren una contaminación significativa a nivel biológico; en contraste, los márgenes marinos están afectados seriamente por la contaminación humana. Algunos ejemplos que se pueden citar son la pérdida de hábitats por la construcción de muelles e instalaciones industriales, el desarrollo del turismo y la maricultura

y el crecimiento de ciudades y pueblos a lo largo de las costas. A pesar de ser difícil de cuantificar, es evidente que la destrucción de playas, corales o marismas, así como la erosión en el litoral son situaciones fáciles de ver en cualquier lugar del mundo; si se sigue manteniendo esta línea de actuación en el futuro, se producirá una progresiva disminución global de la calidad y productividad del medio marino.

La franja costera o costa consta de dos partes, una marina y otra terrestre, íntimamente relacionadas; la zona marina corresponde a las aguas someras e intermareales y la zona terrestre es el área de tierra adyacente formada por playas y acantilados. La costa es la parte marina más vulnerable y más usada; su sensibilidad está directamente unida a la diversidad e intensidad de las actividades que allí tienen lugar y su peligro inmediato estriba en el incremento de la concentración de la población mundial en estas zonas.

El aumento de la explotación en la costa es un reflejo del incremento de la población, de la velocidad de urbanización y de la afluencia de turismo debido a la frecuencia y rapidez del transporte. Estas tendencias se han ido desarrollando en todo el mundo y, por lo tanto, el control del desarrollo costero y la protección de hábitats requerirán importantes cambios en la legislación costera tanto en tierra como en el mar, algo que conlleva grandes problemas sociales y políticos.

Hay una gran variedad de actividades que se desarrollan en tierra y que contribuyen a la entrada de contaminantes al mar, bien directamente o a través de los ríos y la atmosfera, representando las actividades contaminantes de origen marino solamente un pequeño porcentaje de la contaminación total. Además, sólo una pequeña parte de la contaminación de origen marino se extiende más allá de los límites de la plataforma continental permaneciendo la mayoría dentro de las aguas costeras, especialmente en áreas cerradas y con

poca renovación de agua donde puede alcanzar niveles importantes.

Según la comisión de expertos GESAMP (Group of Experts on the Scientific Aspects of Marine Pollution) patrocinada por la ONU[26] , las mayores causas de deterioro a nivel global consideradas a principios de 1990 en el medio marino eran: el desarrollo costero, la destrucción de los habitats, la eutrofización, la contaminación microbiana de los bivalvos y de las playas, la presencia de plásticos en el mar, el aumento progresivo de los hidrocarburos clorados, especialmente en las zonas tropicales y subtropicales, y la acumulación de alquitrán en las playas.

Uno de los mayores problemas es que no son suficientemente consideradas las consecuencias que para el océano tiene el desarrollo costero, ni el hecho de que continúan sin tenerse en cuenta en las actividades terrestres los posibles efectos de éstas sobre las aguas costeras. Parece probable que siga aumentando la presencia humana en la costa y este hecho puede dar lugar a una disminución progresiva de la calidad del medio marino si tanto a nivel nacional como internacional no se toman medidas para reducir desechos y conservar materiales de origen natural.

### **1.1.1 Evolución en el control de vertidos al mar en Gran Canaria**

La demanda de la calidad de vida en el mundo actual está logrando que ciertos países con problemas medioambientales los subsanen a fin de asegurar el crecimiento económico y la competitividad en los diferentes mercados. Tal es el caso, especialmente, en los países que viven del turismo basado en un clima agradable durante todo el año, lo cual potencia el uso masivo del entorno debido a los desplazamientos de muchas personas en busca de condiciones climáticas mejores que las de sus países de origen.

Este es el caso de las Islas Canarias, donde se implantó muy rápidamente una industria hotelera, así como sus derivadas para el disfrute de su clima, en la que la especulación privó sobre cualquier idea de conservación del entorno y de calidad medioambiental. Sin embargo, la gran afluencia de turismo procedente de los países del Centro y Norte de Europa, lugares en los que la calidad de vida está íntimamente ligada a la calidad medioambiental, ha provocado que actualmente se estén logrando resultados muy positivos.

Uno de los grandes problemas planteados hace años en estas islas (y actualmente todavía en muchos lugares de la Península) era la eliminación del agua residual, que en este caso era de tipo básicamente municipal, ya que las islas poseen poca industria. El aumento en el uso de la franja costera daba lugar a una gran cantidad de agua que necesitaba ser depurada y/o vertida; evidentemente, en una isla, lo más lógico parece ser realizar vertidos al mar pero ello lleva consigo una influencia negativa en un entorno propio para el disfrute del turismo.

Durante muchos años y de forma indiscriminada, los vertidos se han realizado en el mar sin control alguno: ni dónde, ni con qué frecuencia, ni de qué procedencia. De esta manera, era fácil encontrar problemas de contaminación estética (malos olores, plásticos y demás elementos flotando, etc...) en las playas o en sus cercanías, lo que produce una influencia negativa en el usuario de la playa y repercute negativamente en la economía de las islas.

Según el modelo descriptivo de evolución de una zona turística propuesto por Wolfe en 1983, el cual lleva incorporados componentes económicos y ambientales, los destinos turísticos siguen un modelo de normativa tipológica conocido como curva de Ellis [75]. En ella, el eje vertical representa el nivel de impacto económico y en el eje horizontal se representan las medidas relativas de impactos medioambientales (Figura 1-1). Cuando se sigue el curso del

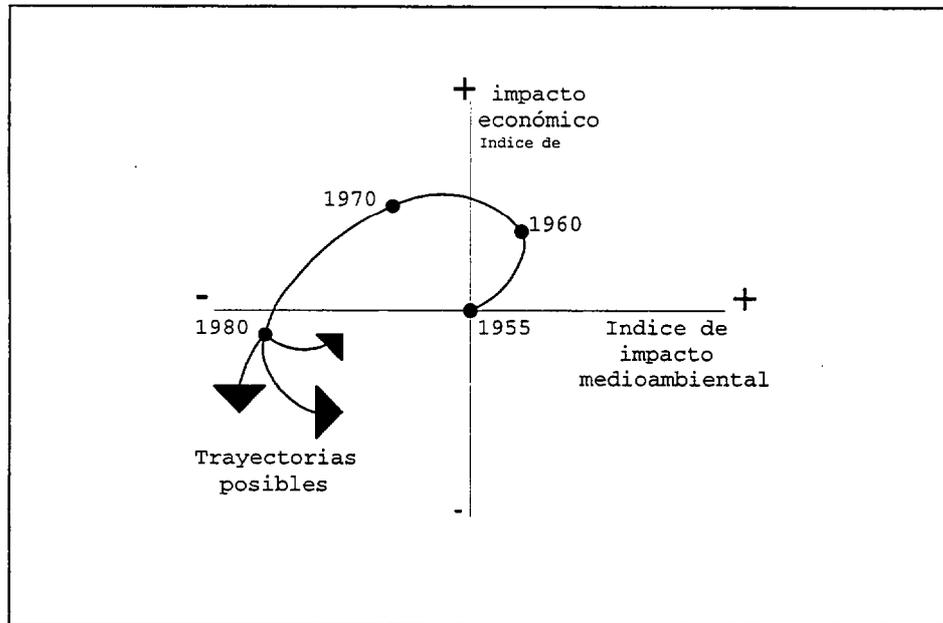


Figura 1-1: Curva de Ellis correspondiente a Torremolinos en la Costa del Sol, Wolfe (1983).

desarrollo de un enclave turístico como Torremolinos en la Costa del Sol [52], se aprecia que el comienzo del desarrollo turístico viene acompañado de unos impactos económicos y ambientales positivos. Sin embargo, con el tiempo, la degradación ambiental se hace dominante, e incluso los beneficios económicos, si bien siguen siendo positivos, disminuyen ya que se aumentan los beneficios embolsados por los inversores y gestores foráneos. Además, también los residentes locales son forzados a pagar precios más altos por la propiedad y los servicios. Como consecuencia de lo anterior, la zona turística excede el punto en el que se logran beneficios económicos. Si no se toman decisiones de gestión adecuadas a esta altura de desarrollo, continuará un descenso económico y ambiental.

Butler (1980) describió un modelo teórico de evolución de un enclave turístico, haciendo uso del concepto de ciclo de vida de un producto (usado habitualmente en marketing) en relación con la industria turística [13]. Desarrolló

un ciclo de evolución de un área turística (Figura 1-2) formado por 6 estados. Comienza con un estado inicial de exploración por unos pocos turistas, a continuación viene uno en el que los residentes locales se involucran con el turismo y después viene el estado de desarrollo en el que comienza a manipularse la industria turística desde el exterior. A partir de aquí comienza el estado de consolidación en el que el turismo se convierte en la mayor fuente de la economía local; de este estado se pasa a uno de estancamiento en el que hay muchos turistas pero la zona deja de ser estar de moda como lugar de turismo y se comienzan a vender propiedades a bajo precio. A medida que el mercado del turismo se va desvaneciendo, comienza el estado de decrecimiento, y si a partir de aquí se quiere recuperar el turismo, se han de tomar medidas gestoras adecuadas como embellecimiento y mantenimiento adecuado de playas, control estético del medio marino, realimentación de playas, etc., es decir, formas de vencer el descenso del número de turistas y de rejuvenecer el área turística. Tal es la situación actual en Gran Canaria.

Al abordar esta tesis se pretendía realizar una simulación de la franja terrestre cercana al mar con el fin de tener en cuenta todos los vertidos incontrolados que se realizaban bien al azar ó bien periódicamente. Simulando la evolución de estos vertidos en el mar se podrían detectar zonas de acumulación de contaminante estéticamente perniciosas en la costa, en zonas próximas a donde existen grandes afluencias de usuarios.

Sin embargo, la política de saneamiento de vertidos y de encauzamiento de todos los vertidos incontrolados realizada por ciertos Ayuntamientos de las islas, ha logrado resolver, aunque sólo sea parcialmente, el problema del control de vertidos, dado que la unión de aguas de diferentes procedencias da lugar a pérdida de información sobre el origen del vertido.

Por ello en esta tesis los datos sobre aportaciones de residuos al mar pro-

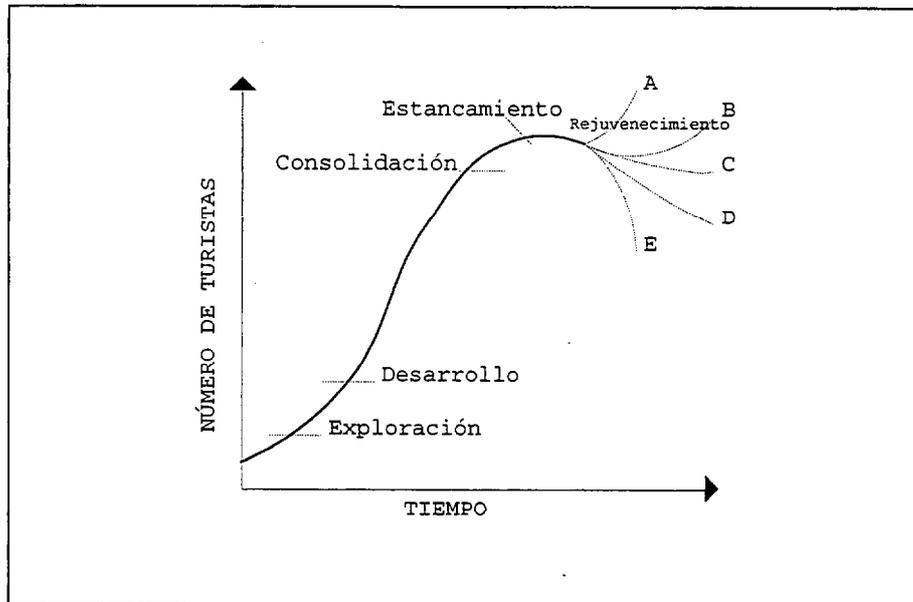


Figura 1-2: Ciclo de evolución de un enclave turístico (Butler, 1980).

cederán sólo de vertidos controlados realizados por empresas del sector de calidad de aguas (EMALSA, ELMASA), lo que produce un conocimiento medio del tipo de vertido, velocidad de salida, BOD, coliformes fecales, etc. .

### 1.1.2 Modelización de los procesos físicos en la franja costera

Los problemas relacionados con el medio ambiente son esencialmente interdisciplinarios por la complejidad inherente (Figura 3-1) que llevan los sistemas naturales siendo la contaminación costera uno de ellos. El investigador en este campo debe familiarizarse con temas como procesos físicos de mezcla y dilución, procesos biológicos y químicos, modelización matemática y computacional y toma de datos y medidas [81].

Si nos centramos en los residuos procedentes del uso urbano e industrial,

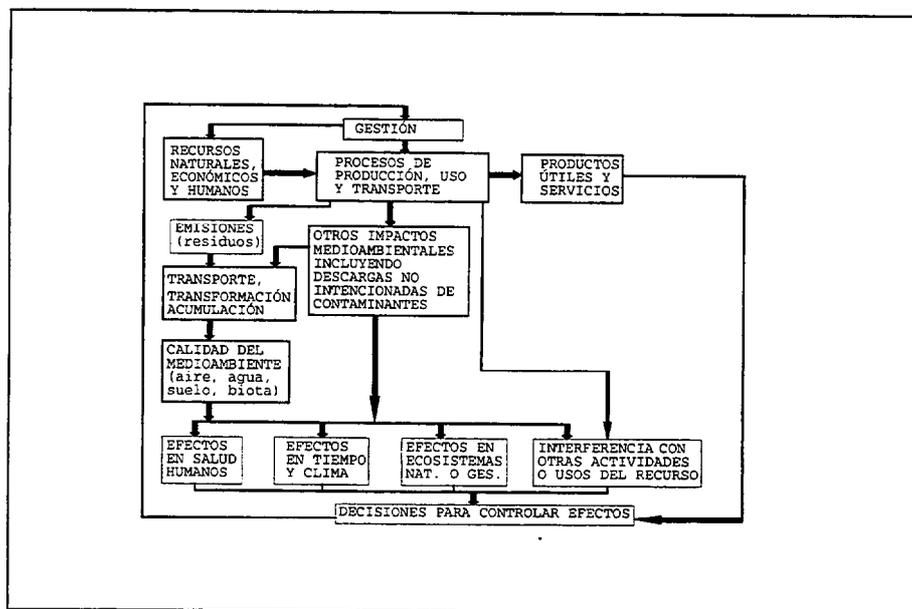


Figura 1-3: Esquema de protección medioambiental (USA National Academy of Sciences, 1977).

un buen esquema de control medioambiental es aquél que optimiza adecuadamente y que dependiendo de los contaminantes producidos, tenga en cuenta el control de contaminantes en la fuente (pretratamiento en los sistemas de alcantarillado), el tratamiento de residuos y su posterior dispersión en el medio ambiente; ello conlleva tratar a menudo interfaces entre las actividades del hombre ya que se tendrá que optimizar agua, residuos y el medio en el que se vaya a verter. Entre los residuos posibles y de menor a mayor toxicidad están las sales y sedimentos inorgánicos naturales, el calor residual (caso de plantas con sistemas de enfriamiento por agua), residuos orgánicos, metales traza, sustancias químicas orgánicas sintéticas y materiales radiactivos (hospitales, laboratorios químicos).

El movimiento de una sustancia de cualquier origen así como su concentración en un punto cualquiera del océano depende de un gran número de

factores. La difusión o transporte de sustancias mediante movimientos al azar moleculares o turbulentos del medio es uno de los más influyentes en la formación de los campos de salinidades, la concentración de oxígeno existente en el medio y en la formación de elementos biogénicos y de contaminantes en las aguas del océano. Por lo tanto, analizar la difusión en el océano es importante para entender los mecanismos de formación de los campos hidrofísicos naturales así como los originados por la contaminación humana.

En el océano aparecen factores de origen biológico (la acumulación y transporte de sustancias que se produce en los organismos vivos), químico (degeneración química de sustancias, formación de otros compuestos nuevos al reaccionar con otras sustancias presentes pudiéndose producir por ejemplo gases ó precipitaciones), físico (transiciones entre estados, coagulación, adsorción, degeneración nuclear) y finalmente los de origen mecánico (transporte debido al movimiento del océano). El transporte mecánico a su vez puede subdividirse en el transporte debido a las velocidades medias de la corriente ó **advección** y el transporte causado por la presencia de fluctuaciones al azar ó **difusión** [57]. Bajo este último término se pueden encontrar dos tipos de movimiento, la difusión molecular y la turbulenta. La principal diferencia entre difusión molecular y turbulenta radica en el carácter multiescalar del régimen turbulento, lo que produce la inherente correlación entre los movimientos de las partículas individuales del contaminante que se esté difundiendo en los diferentes puntos del flujo; ello explica que la difusión turbulenta dependa de la densidad con la escala del fenómeno que se estudie.

La predicción del transporte mecánico de sustancias en el océano es una tarea ardua: requiere conocer el comportamiento de un gran número de factores que afectan al proceso. Por ejemplo, para calcular el transporte advectivo de sustancias, se deben conocer los valores de campo de velocidades medias y

su variabilidad temporal en la región oceánica que se quiera estudiar. Estos datos se pueden obtener a partir de mapas ó haciendo cálculos usando los campos de densidad del agua, de viento y los flujos de calor a través de la superficie del océano; además para promediar, se ha de escoger una escala espaciotemporal adecuada ya que se influirá en el nivel de no estacionariedad del campo de velocidades y en la relativa intensidad de sus componentes fluctuantes de tipo turbulento.

Encontrar las componentes de la turbulencia o su parametrización ofrece bastante dificultad en sí porque las características de la turbulencia del océano dependen de su estado dinámico, que a su vez viene descrito por los gradientes de velocidad de la corriente media, por las ondas internas y superficiales y por la estratificación debida a la densidad de sus aguas. Así, si las capas del océano poseen una estratificación estable, la turbulencia vertical y por lo tanto la difusión vertical son más lentas; si la estratificación es inestable, como cuando existe convección, un contaminante introducido en las capas superficiales del océano puede dispersarse rápidamente hasta una gran profundidad

Es evidente que un trabajo tan complejo como modelizar la costa teniendo en cuenta todos los factores anteriormente descritos, es una tarea ingente que corresponde realizar a un nutrido grupo de investigación interdisciplinar. Por lo tanto, esta tesis se limitará a tratar la parte mecánica del transporte de contaminantes en la costa pero utilizando una modelización alternativa a las usadas hasta ahora y un índice de contaminación basado en contaminantes pasivos, es decir, aquéllos que no alteran la hidrodinámica y por lo tanto son llevados por los movimientos naturales del agua.

### 1.1.3 Mezcla del vertido con el agua medioambiental marina

Si consideramos un emisario submarino típico, esto es, una conducción bastante larga que descarga residuos en forma líquida al mar a través de una estructura difusiva, los procesos de mezcla y de dispersión se pueden dividir en tres zonas desde el punto de vista de su estudio. Cerca de la descarga, la mezcla se realiza en los chorros flotantes, un fenómeno dominado por el momento y la flotación de la descarga. Más lejos de la descarga, el transporte y mezcla son realizados mediante las corrientes del océano y la turbulencia y son relativamente insensibles a las condiciones exactas de descarga ó al hecho de que la descarga haya sido flotante. Hay entre estas dos regiones una zona donde se establece el campo de vertido; la dinámica de esta región depende tanto del momento como de la flotación en el vertido y en las corrientes oceánicas [21].

Las variaciones diarias de la estratificación de la densidad pueden ser causadas por efectos de la marea, ondas internas y variaciones de las corrientes. Normalmente la estratificación de la densidad será más pronunciada durante los meses más templados cuando la insolación aumenta la temperatura en la capa superficial ó durante la estación de lluvias ya que la escorrentía de éstas disminuye la salinidad superficial.

El fin principal de un sistema de salida mediante difusores es conseguir una mezcla inicial rápida del vertido en el agua ambiental. La dilución inicial obtenida depende principalmente de la descarga, la longitud del difusor, la profundidad de descarga, las corrientes ambientales y la estratificación de la densidad. Ahora bien, el cálculo de estos valores de dilución está sujeto a errores: los resultados sólo son exactos al 20%, aunque son los únicos que están bajo control del diseñador. Además, el análisis asume que el vertido no influencia la dinámica marina reinante en ese momento.

Después de la dilución inicial, el campo de vertido está sujeto a una posterior mezcla que es de menor importancia en general. Mientras que la dilución inicial obtenida en un difusor típico bien diseñado es del orden de 100 ó más, la obtención de una posterior mezcla en el medio ambiente del orden de horas es solamente un factor de aproximadamente 5 ó 10. Además, tiene más importancia en este caso el transporte debido a las corrientes que la dispersión posterior. Estos procesos de dispersión y transporte no están bajo el control del diseñador del emisario, pero son determinantes para saber si un vertido de aguas residuales puede ser perjudicial para un área específica. El transporte de residuos—incluso si están diluidos—hacia una playa deberá evitarse siempre que se pueda. Si no se puede evitar completamente, se intentará situar la estructura difusiva lo más lejos posible hacia mar abierto con el fin de aumentar el tiempo de llegada ya que cuanto más tarde en llegar, más importante será la degradación bacteriana.

Un campo de vertido puede llegar a la playa de dos maneras: si el vertido alcanza inmediatamente la superficie, puede ser transportado hacia la costa por las corrientes superficiales. Si el campo inicial está sumergido, puede ser traído hacia la playa mediante corrientes subsuperficiales y luego llegar a la superficie mediante un afloramiento costero. Será necesario analizar series de corrientes marinas y de vientos en diferentes estaciones del año para poder obtener datos sobre los distintos casos con el fin de poder predecir su dispersión y transporte.

#### **1.1.4 Estimación del campo de concentración del contaminante**

Antes de estimar la concentración de los contaminantes vertidos al medio marino, se tiene que establecer de antemano la cantidad y concentración admisibles de una sustancia dada para ser considerada inocua para los usuarios

del mar ó para los organismos marinos. Una forma de saberlo sería usando el concepto de **capacidad de asimilación**  $A_{mi}$  del océano ó de alguna de sus áreas [44], que se define como la cantidad de contaminante  $i$  (en toda el área considerada ó en una unidad de volumen de agua marina) que puede ser acumulada, descompuesta, transformada (bajo la influencia de factores químicos ó biológicos) y extraída (debido a la sedimentación, difusión y otros procesos) de un volumen dado en una unidad de tiempo sin afectar al funcionamiento normal de un sistema ecológico  $m$  existente en dicho volumen.

La capacidad de asimilación depende de muchos factores: el estado dinámico de la masa de agua, la estructura del sistema biológico y las propiedades características de su funcionamiento y las propiedades de los contaminantes. Entre los factores que favorecen la autodepuración de la masa de agua están el transporte hidrodinámico del contaminante, su oxidación microbiológica, las transformaciones químicas y físicas, la sedimentación de las partículas no biogénicas y la biosedimentación; los más importantes son los procesos debidos a fenómenos hidrodinámicos, la oxidación microbiológica y la biosedimentación.

Para estimar la capacidad de asimilación  $A_{mi}$  de una masa de agua es importante conocer aquellas especies presentes en el sistema ecológico que son más sensibles a la contaminación del medio mediante un contaminante dado; usando los elementos más sensibles del sistema ecológico, se tienen que determinar las concentraciones máximas permisibles  $c_{oi}$  de un contaminante dado  $i$  en el medio y el "coeficiente multiplicativo"  $K_i$  de la cantidad de contaminante por unidad de volumen que puede ser procesado por un sistema ecológico dado  $m$  ó que puede eliminarse del volumen de agua durante el tiempo medio asumido debido a procesos diferentes. Por lo tanto la capacidad de asimilación

vendrá dada por

$$A_{mi} = c_{oi}K_iV_m$$

donde  $V_m$  es el volumen de agua considerado.

La definición de las concentraciones de sustancias nocivas permitidas en una zona marina es muy compleja al estar basada en los organismos de la biocenosis existente en el área de estudio que mejor detecten el contaminante. Hay que tener en cuenta que la influencia negativa de una sustancia puede manifestarse al cabo de un cierto lapso en el tiempo y aparecer sus consecuencias mucho después que el organismo estuvo en contacto con el contaminante. Tal sería el caso en que se hubiera afectado el sistema genético del organismo y el efecto del contaminante se transmitiera a su descendencia.

El tiempo que dura el contacto con el contaminante es también importante, pues puede producir cambios patológicos incluso si la concentración es baja. Todo ello hace que sea necesario tener en cuenta no solamente la concentración permisible de cada una de las sustancias contaminantes en el agua marina sino también el tiempo de existencia de una u otra concentración de una sustancia dada en la masa de agua para elaborar los niveles de descarga permitidos. Si las características cuantitativas del cambio de los procesos biológicos en el organismo debido a la sustancia  $i$  se representan por  $\Delta B_i$ , el criterio de calidad del agua puede escribirse [1]

$$\Delta B_i < \Delta B_i^0 = f_1(c_i, t_i)$$

donde  $c_i$  es la concentración de la sustancia  $i$ ,  $t_i$  es el tiempo de influencia de la concentración dada de la sustancia en un organismo,  $\Delta B_i^0$  es el nivel permitido de cambio fisiológico y  $f_1$  es una función. Esta ecuación puede generalizarse para el caso de influencias simultáneas y dependientes producidas

a un organismo por varias sustancias nocivas.

Las fórmulas anteriores serán de tipo estocástico en vez de determinista si hay gran número de organismos de la misma especie, edad y sexo, pues cada organismo reacciona ante un contaminante de forma diferente; en este caso se tendrá que usar el concepto de probabilidad de los cambios fisiológicos del organismo correspondientes y para definir el criterio de calidad de agua se tendrán que imponer las probabilidades permitidas de cambios desfavorables,

$$F_0 < F \{ \Delta B_{ij} < \Delta B_{ij}^0 \}, \quad i, j = 1, 2, \dots, k.$$

Como los valores de  $\Delta B_{ij}$  son funciones de  $c_i$  y  $t_i$ , la anterior ecuación se expresa, como es habitual, en la forma:

$$F_0 > F \{ c_i > c_{0i}; t_i > t_{0i} \} = \int_{c_{0i}}^{\infty} \int_{t_{0i}}^{\infty} p(c_i, t_i) dc_i dt_i$$

donde  $p(c_i, t_i)$  es la densidad bidimensional de probabilidad de los valores de concentración y duración de existencia de estas concentraciones en el punto  $(x_0, y_0, z_0)$  considerado.

Si el punto considerado está a cierta distancia del effluente de la carga contaminante, la concentración de contaminante en él depende sustancialmente tanto de la dirección como de la magnitud de la velocidad de la corriente en el área marina considerada. Si la corriente se dirige directamente desde el punto de descarga al punto de uso del agua, entonces la concentración de contaminantes será máxima en  $(x_0, y_0, z_0)$  pero si la corriente va en sentido contrario, el medio acuático en la zona de disfrute del agua estará poco contaminada. Si el módulo de la velocidad de corriente  $|u|$  es lo suficientemente pequeño, el área contaminada tampoco puede extenderse hasta el punto  $(x_0, y_0, z_0)$  y entonces el argumento de la función  $p(c_i, t_i)$  puede ser reemplazado por los valores de

$|u|$  y de  $\varphi$  donde  $\varphi$  es la dirección del vector velocidad de la corriente respecto a las coordenadas geográficas ó la dirección desde el effuente de descarga del contaminante hasta el lugar de uso del agua. Por lo tanto, la anterior fórmula se puede escribir como

$$F_0 > \int_{\Omega} p(|u|, \varphi, t_i) d\varphi dt_i$$

La integral se extiende sobre la parte  $\Omega$  del espacio de tres dimensiones  $(|u|, \varphi, t_i)$  donde las concentraciones de contaminantes determinadas por los valores de  $|u|$ ,  $\varphi$ , y  $t_i$  excedan los valores permitidos. Tanto el dominio de integración como la forma de la función de densidad de probabilidad  $p(|u|, \varphi, t_i)$  son complicados y en general la integración solamente podrá efectuarse por métodos numéricos. La función de densidad de probabilidad puede ser determinada procesando gran cantidad de datos observados en la dirección y magnitud de las velocidades de la corriente en el área donde va a descargar el effuente contaminante; si se tiene disponible la rosa de corrientes, las concentraciones de contaminantes en la zona marina de disfrute pueden ser estimadas mediante otro método para cada uno de las particiones seleccionadas del módulo y la dirección de las velocidades de corriente y con ello hallar  $t_i$ .

El tiempo de existencia de una cierta concentración de contaminante en un elemento dado de la masa de agua depende del régimen de descarga del effuente y del campo de corrientes ó de la variabilidad temporal de los factores que autodepuran el agua. El flujo de sustancia contaminante en el effuente no puede ser considerado como determinista, hay casos en que la concentración del número de contaminantes en los colectores de alcantarillado se describe mediante una función al azar del tiempo con distribuciones normales[1].

Evidentemente, los cambios fisiológicos permitidos pueden ser diferentes para el plancton, el neuston, el necton y el bentos; además, dentro del mismo

sistema, las reacciones de los varios grupos de organismos ante la contaminación son diferentes. Las sustancias nocivas asimiladas por los organismos de niveles tróficos bajos pueden transferirse a través de la cadena trófica hasta organismos de niveles más elevados y puede ocurrir que determinadas especies se vean afectadas por la contaminación debido a haber consumido alimentos que hayan acumulado sustancias tóxicas (un ejemplo cercano sería la intoxicación humana por ingestión de bivalvos que acumulan sustancias nocivas -para el hombre- en sus tejidos grasos, aunque no lo sean para el propio organismo). En consecuencia, para escoger adecuadamente las concentraciones de contaminantes tóxicos permitidas y los tiempos de residencia de las zonas contaminadas es necesario considerar todas las posibles relaciones tróficas entre los componentes individuales de la biocenosis en vez de considerar la reacción de cada organismo ante los contaminantes.

## **1.2 Teoría de automatatas**

### **1.2.1 Introducción**

La teoría ecológica está formada por dos partes bien diferenciadas: una es la que se ocupa de los procesos (como la dinámica de poblaciones) y otra tiene en cuenta las variaciones espaciales (tal es el caso de la ecología de las comunidades). Ambas partes tienen poco en común: en general los procesos dinámicos presuponen homogeneidad espacial y una transferencia de información inmediata entre las diferentes poblaciones ó compartimentos, por tanto se consideran como modelos puntuales que no tienen una extensión espacial. Los modelos de distribución espacial, a su vez, no incluyen habitualmente procesos dinámicos. Se debería intentar por lo tanto amalgamar de alguna forma ambas partes desarrollando una teoría de “ecomorfología dinámica” ó

“dinámica ecomorfológica” que trate de incorporar la estructura espacial en los modelos dinámicos. La manera clásica de conjuntar ambas cosas es el estudio de las ecuaciones de reacción-difusión, un campo en desarrollo continuo [53]. Otra forma, inspirada en la resolución numérica de EDP, la proveen los autómatas celulares, y sus formalizaciones parecen ser capaces de cumplir este propósito.

Debido al desarrollo de los “supercomputadores” en la década de los 70, hoy en día se utiliza una arquitectura de ordenadores muy diferente a la clásica desarrollada por von Neumann en los 40. Ésta se basaba en un modo de computación secuencial, de tal forma que en un momento dado, sólo algunos componentes de la máquina están activos; ésto suponía un límite al modo de actuación de los ordenadores secuenciales. La introducción de arquitecturas paralelas y la implementación de “chips” VLSI en el hardware de los ordenadores han permitido un fantástico aumento en las velocidades de computación.

Ahora bien, tener un buen conocimiento del funcionamiento en paralelo de miles de componentes interconectados daba lugar a problemas teóricos importantes, como eran los de analizar el comportamiento de una arquitectura dada, sintetizar una determinada arquitectura para que realizara determinada tarea u optimizar algunas tecnologías nuevas. Debido a ello, al terminar la Segunda Guerra Mundial, J. von Neumann propuso desarrollar la teoría de *redes de autómatas* como una herramienta matemática para estudiar los ordenadores.

En 1943, el matemático Pitts y el neurofisiólogo McCulloch propusieron un sistema compuesto de **neuronas formales** que representaban unidades sujetas a reglas lógicas de comportamiento para transmitir y procesar la información y que estaban inspiradas en lo que entonces se creía que era el funcionamiento de las neuronas del cerebro. Así demostraron que la potencia computacional de

esta máquina era equivalente a la máquina teórica de referencia o máquina de Turing, lo que suponía una gran ventaja ya que las propiedades de la máquina de Turing eran perfectamente conocidas.

Por las mismas fechas, los autómatas celulares fueron introducidos en 1948 por J. von Neumann, el "padre" del ordenador moderno, con el fin de comparar los autómatas "naturales" o seres vivos con los autómatas artificiales u ordenadores; en un intento de abstraer la estructura lógica de la vida [70], trató de desarrollar una red de autómatas que pudiera exhibir una de las características más importantes de la vida como es la autorreproducción. Hasta entonces se suponía que las máquinas artificiales podrían producir objetos de complejidad menor que la suya en contraposición a lo que ocurre en los organismos naturales en los que por medio de la evolución y la adaptación, aumenta la complejidad con la descendencia.

El modelo desarrollado por von Neumann, conocido como autómata autorreplicante, está basado en una reducción del mundo real a una retícula bidimensional celular en la que cada célula de la retícula representa pequeños entes matemáticos o autómatas que pueden estar en uno de los 29 estados diferentes definidos en analogía con el sistema nervioso (estado de reposo ó de excitación, recepción ó transmisión de la señal nerviosa, etc...). Inicialmente la retícula contiene dos grupos de células que no están en estado de reposo: el 'constructor' (200.000 células) y el 'organismo' que se quiere reproducir; a continuación, se comienza a ejecutar una evolución dinámica en la red que se detiene cuando se haya producido una copia del organismo en alguna parte de la retícula ya que con ello se ha logrado reproducir el organismo.

Otro de los trabajos más conocidos de esas época fueron los de Ulam sobre "auxología celular" en 1962 [68] quien, además, fue el pionero en el uso heurístico de los ordenadores. Desde entonces, los estudios sobre autómatas

celulares han pasado por largos periodos de aletargamiento interrumpidos por explosiones repentinas de entusiasmo y nuevos resultados, coincidiendo estos últimos con el desarrollo del “hardware” de los ordenadores. En los años 70 los ordenadores se popularizaron de nuevo y los autómatas celulares se hicieron muy conocidos debido sobre todo a Conway y su “Game of Life”.

En 1970 J. Conway [18] obtuvo también la propiedad de computación universal mediante el programa Life que diseñó para simular una población de organismos vivos ó células que interactúan. Se supone que la población “vive” en una retícula bidimensional potencialmente infinita y que en cada nodo de la retícula hay una célula que puede estar en uno de los dos posibles estados, 0 si está muerta y 1 si está viva. Se parte de la hipótesis de que solamente puede haber un número finito de células vivas para cada tiempo  $t$ ; las células cambian de estado en paralelo para cada *función de transición* que depende solamente de los 8 vecinos más próximos a la célula (entorno de Moore) en la retícula. Las funciones de transición son escogidas para ‘simular la vida’: una célula viva puede sobrevivir hasta la generación posterior si y sólo si tiene exactamente 2 ó 3 células vivas en su entorno, de lo contrario muere; una célula revive en la generación posterior si y sólo si tiene exactamente 3 células vivas en su entorno. El programa Life y sus diferentes variantes han sido descritas ampliamente en revistas científicas porque exhiben una sorprendente variedad de comportamientos dinámicos; el comportamiento *global* que surge de esta dinámica puede dar lugar a *puntos fijos*, *ciclos límite*, *configuraciones viajeras* ó “*gliders*” y configuraciones que aumentan en tamaño siendo famosa la ‘glider gun’ que produce una configuración viajera cada 30 generaciones. La importancia del programa Life reside en que a partir de unas reglas de transición *locales* muy simples se llega a un comportamiento *global*, lo que representa un compromiso entre la complejidad de las evoluciones dinámicas y su estabilidad.

Hoy en día, debido a los procesadores paralelos, se ha vuelto a despertar el interés en los autómatas celulares, con énfasis en la modelización de procesos físicos tales como la dinámica de fluidos ó biológicos como la reproducción de formas.

## 1.2.2 Autómatas Celulares

Los autómatas celulares son idealizaciones matemáticas simples de sistemas naturales. Son autómatas distribuidos en los nodos de una red periódica definida como una estructura geométrica discreta invariante bajo ciertas operaciones de traslación y rotación. El grupo  $\mathcal{Z}$  de los números enteros genera una red celular unidimensional (es decir, una línea infinita de autómatas). Como ya se nombró anteriormente, el primer autómata celular fue propuesto por von Neumann para los nodos de una red bidimensional cuadrada.

En estas redes de autómatas la conectividad de cada autómata, de tipo celular en este caso, está limitada mediante un **entorno** que consta normalmente de los nodos más próximos a él, de modo que la estructura del entorno mantenga las simetrías de traslación y de rotación de la red. Teóricamente la red es infinita, pero en la práctica siempre posee algún tipo de fronteras, por lo que se tendrán que enumerar condiciones de contorno que, en general, suelen considerarse periódicas; con ello la estructura de la conectividad será circular en vez de lineal ó toroidal en vez de plana.

Los autómatas celulares son modelos matemáticos utilizados en sistemas naturales complejos donde actúan muchos componentes de naturaleza simple con interacciones locales pero que, sin embargo producen pautas complejas de comportamiento global. Complejidad no solamente en sentido formal —es decir, con capacidad de computación universal— sino también en sentido intuitivo ya que son capaces de producir en las salidas gráficas formas fascinantes.

La aproximación mediante autómatas celulares es, por lo tanto, dinámica; se parte de una **descripción local** del sistema, al igual que en los métodos de ecuaciones diferenciales, que permite conocer los cambios de estado de los componentes a corto plazo como resultado de sus interacciones. Se espera que el método proporcione la **descripción global** para conocer el comportamiento a largo plazo del sistema como un todo. El comportamiento global puede ser muy complejo y puede ser interpretado mediante propiedades emergentes: la idea que se esconde detrás es que las propiedades no son predecibles *a priori* a partir de la estructura de las interacciones locales, pero tienen una significación funcional cuando se habla de modelización biológica ó de aparatos tecnológicos.

Las reglas de cambio de estado son en un principio las mismas para todos los autómatas de la red, aunque algunos autores han desarrollado los llamados autómatas celulares no homogéneos que son estructuras celulares con autómatas diferentes.

### **Autómatas Celulares Bidimensionales**

Los autómatas celulares de dos dimensiones han resultado ser unas herramientas de modelización muy valiosas en el campo de la física del crecimiento, la Química Física y la Hidrodinámica ya que hacen posible un seguimiento de los mecanismos de interacción entre autómatas y la observación del estado de la red en cualquier momento de la iteración. Las propiedades dinámicas en estas disciplinas se describen habitualmente mediante ecuaciones en derivadas parciales no lineales que, en general, no pueden ser resueltas mediante métodos analíticos. Los modelos clásicos directos (discretización mediante cálculo numérico) necesitan una computación complicada e intensiva (recursos de memoria, iteraciones, etc.); por lo general, la calidad del cálculo depende del parámetro

externo que viene dado por el paso de malla y que puede dar lugar a complicaciones por criterios de estabilidad. Sin embargo, cuando los autómatas celulares pueden ser utilizados son unas herramientas muy valiosas ya que permiten una alta velocidad de computación, se usan programas muy sencillos y pueden visualizarse directamente la evolución de las "imágenes" generadas por estos sistemas (interficies, cristales, estructuras hidrodinámicas, frentes de fuego ó de agua, etc.).

La estructura de conectividad en dos dimensiones está relacionada con la simetría de la red, algo ya conocido desde hace tiempo en Cristalografía; mientras se requiera que exista simetría de traslación y de rotación alrededor de cada nodo, la simetría rotacional puede ser solamente de orden 2, 3, 4 ó 6. En los autómatas bidimensionales se pueden tener muchos tipos de redes y de estructuras de entornos; se simulan redes **triangulares** en las que cada autómatata tiene un entorno de 6 nodos, **cuadradas** ó de 4 nodos y **hexagonales** ó de 3 nodos; existen dos tipos de entornos para estas redes, el de **von Neumann** ó entorno de 5 entradas en el que cada autómatata tiene su entrada mas la de los 4 nodos más próximos y el entorno de **Moore** ó de 9 nodos que consiste en los 8 nodos que le rodean mas el propio autómatata. En ambos, el valor de la célula ó nodo central se actualiza mediante una regla que es función del valor que toman los nodos próximos (4 ú 8 según el caso, Figura 1-4).

El número de posibles reglas que puede aplicarse a un autómatata de dos dimensiones depende del número de valores que pueda tomar el nodo, del tipo de regla que se vaya a aplicar y del tipo de red y entorno. Un ejemplo se aprecia en la Tabla 1.1, donde se supone un autómatata celular de dos dimensiones cuyos nodos sólo pueden tomar los valores 0 ó 1, lo que corresponde a un valor de  $k = 2$

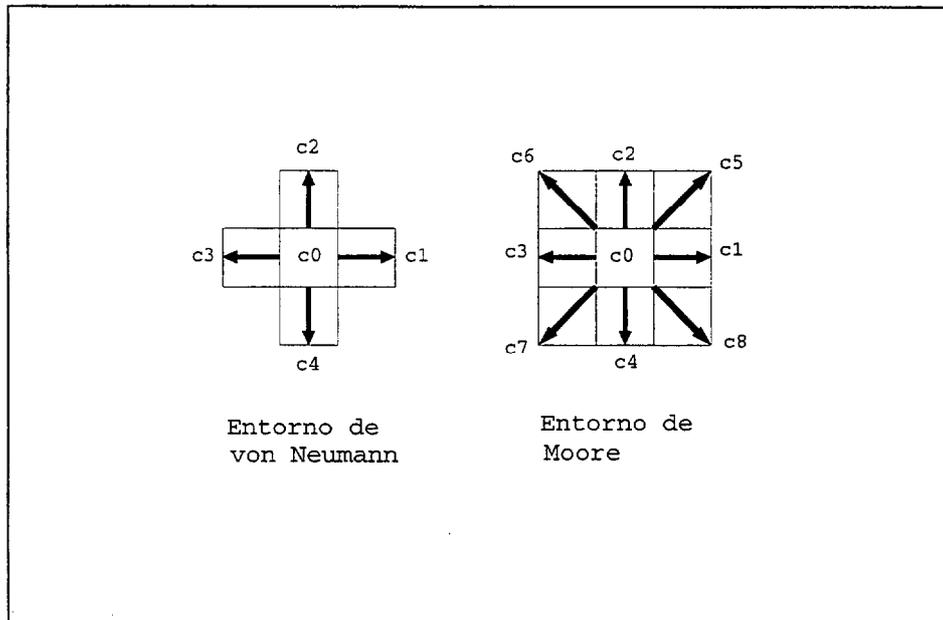


Figura 1-4: Tipos de entornos en redes bidimensionales.

TIPO DE REGLA	TIPO Von Neumann	DE Moore	ENTORNO Hexagonal
General	$2^{32} = 4x10^9$	$2^{512} = 10^{154}$	$2^{128} = 3x10^{38}$
Rotacionalm. simétrica	$2^{12} = 4096$	$2^{140} = 10^{42}$	$2^{64} = 2x10^9$
Simétrica reflectiva	$2^{24} = 2x10^7$	$2^{288} = 5x10^{86}$	$2^{80} = 10^{24}$
			$2^{74} = 2x10^{22}$
Completam. simétrica	$2^{12} = 4096$	$2^{102} = 5x10^{30}$	$2^{28} = 3x10^8$
Totalitaria externa	$2^{10} = 1024$	$2^{18} = 3x10^5$	$2^{14} = 16384$
Totalitaria	$2^5 = 32$	$2^9 = 512$	$2^7 = 128$

Tabla 1.1: Número de posibles reglas y entornos para autómatas celulares con dos posibles estados en cada nodo y varios entornos del tipo mostrado en figura1-4

## Aplicaciones de los autómatas celulares

Los autómatas celulares pueden ser investigados desde diferentes puntos de vista según el interés de estudio, pero en el caso que nos ocupa se utilizan como instrumentos de modelización. Esta aplicación puede tomar diferentes formas:

a) Como herramientas computacionales para modelos formulados independientemente. En este caso los autómatas celulares se utilizan como una aproximación y, de hecho, una implementación de una ecuación en derivadas parciales en el ordenador es una simulación de un autómata celular donde tanto el espacio como el tiempo son discretizados. Este tipo de modelos entran dentro de la definición formal de los autómatas celulares aunque no de su aplicación típica: el número de estados es elevado y la función de transición toma una forma específica (algebraica).

b) Como modelos de fenómenos físicos. Tradicionalmente la mayoría de los fenómenos físicos han sido representados mediante modelos continuos. Esta práctica comenzó con la Física clásica y ha sido imitada por muchas otras ciencias (incluida la ecología), incluso cuando los datos primarios de los sistemas no vienen en forma continua, sino que son entidades discretas (p.e., organismos). Recientemente, sin embargo, debido a que muchos modelos conceptuales físicos vienen caracterizados por la evolución conjunta de una familia de partículas discretas, se han utilizado autómatas celulares como una alternativa a las ecuaciones diferenciales en vez de usarse como una aproximación.

Un ejemplo son los problemas de dinámica de fluidos modelizados tradicionalmente mediante la ecuación de Navier-Stokes y aproximados mediante discretizaciones de ecuaciones en derivadas parciales. Actualmente son estudiados mediante una formulación a base de autómatas celulares y se aprecia que el comportamiento macroscópico producido por la red de autómatas celu-

lares es el esperado al hacer uso de las ecuaciones de Navier Stokes (modelo conocido como FHP, acrónimo de sus autores) [23]. Hay que tener en cuenta que estos modelos son completamente deterministas mientras que la conceptualización microscópica discreta [28] supone, tradicionalmente, que las entidades microscópicas se comportan estocásticamente, es decir, la información local sobrepasa la necesidad de aleatoriedad [66]. Por lo tanto, nos centraremos en las aplicaciones de los autómatas celulares en hidrodinámica, conocidos como gases reticulares, por su aplicabilidad en esta tesis.

Cabe notar aquí que en un pasado no muy lejano la teoría de catástrofes se popularizó porque hacía de puente entre un microsistema continuo y unas observaciones macroscópicas discretas. Los autómatas celulares hacen de puente en sentido contrario ya que las reglas microscópicas de transición de los autómatas celulares, siendo enteramente discretas, pueden dar lugar a un comportamiento macroscópico continuo (como es el caso de la difusión). También pueden dar lugar a discontinuidades a gran escala como las que se estudian en las aplicaciones a la teoría de catástrofes.

### **Modelo de gas reticular FHP**

Desde el punto de vista microdinámico el gas reticular FHP está formado por partículas discretas e iguales que se mueven de un lugar a otro en una red plana triangular chocando cuando se encuentran y conservando el número de partículas y el momento después de cada choque; su dinámica evoluciona con pasos temporales discretos y su evolución en un paso de tiempo puede verse en la figura 1-5. En la figura 1-5(a) se observa la configuración inicial en la que cada flecha representa una partícula de masa unidad moviéndose con velocidad unidad (una unidad de red por cada paso de tiempo) por una de las 6 posibles direcciones dadas por los enlaces de la retícula. Solamente una partícula, y con

una velocidad dada, puede residir en un lugar dado y por lo tanto es suficiente poseer 6 bits de información para describir la configuración de un nodo.

El comportamiento de los fluidos en movimiento viene descrito en Mecánica de fluidos mediante la ecuación de Navier-Stokes, siendo ésta una ecuación en derivadas parciales no lineal. Cuando las velocidades son pequeñas estamos ante un régimen laminar, la ecuación se linealiza y resuelve sin dificultad, bien sea analíticamente—si los objetos en movimiento ó los obstáculos son sencillos— o mediante métodos numéricos. Sin embargo, cuando la velocidad es grande y el régimen es no estacionario, aparecen inestabilidades y no pueden usarse métodos analíticos; en este caso los métodos numéricos son a veces difíciles de usar ya que se deben tener en cuenta escalas de diferente tamaño y las redes de fuerzas son muy pequeñas ó variables.

El régimen de flujo de un fluido depende del número de Reynolds que se define como

$$Re = \frac{vL}{\eta/\rho}$$

donde  $v$  es la velocidad media del fluido,  $L$  es una dimensión característica del flujo como por ejemplo el tamaño de un obstáculo y  $\eta/\rho$  es la viscosidad cinemática del medio, es decir, la proporción entre la viscosidad y la masa específica del fluido. Las inestabilidades hidrodinámicas aparecen cuando  $Re$  es del orden de 10.

La ecuación de Navier-Stokes es una descripción macroscópica de la evolución del campo de velocidades. Contiene términos que dependen de la difusión, advección, viscosidad y latitud. Teniendo el concepto de autómata en mente, se puede aproximar el problema desde un punto de vista más básico y diferente comenzando a partir de la descripción microscópica de las partículas del fluido. Primeramente, se discretiza el espacio y se representa mediante una red celular; a continuación se representa el fluido situando partículas que se mueven a

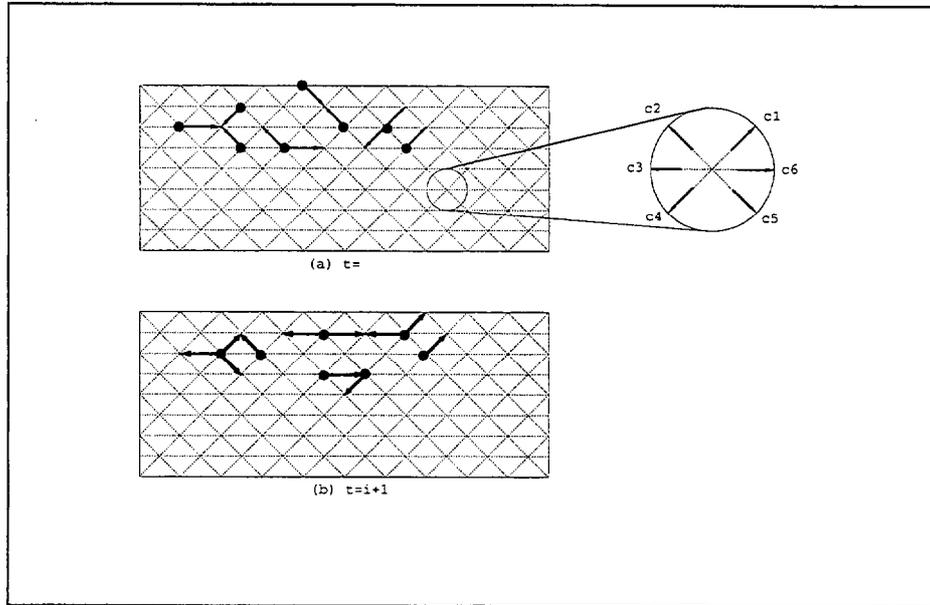


Figura 1-5: Discretización del tiempo y el espacio para el autómata de gas reticular FHP. Las partículas se mueven en una retícula hexagonal saltando al nodo más cercano en cada paso de tiempo. Cada nodo tiene 6 canales ( $c_1, \dots, c_6$ ) que corresponden a cada posible dirección de movimiento.

velocidad constante a lo largo de los enlaces de la red. Cada nodo de la red se considera como un autómata cuyas entradas son los nodos adyacentes y generalmente se trabaja con redes triangulares de dos dimensiones por razones de isotropía.

La configuración de entrada del autómata se define por la presencia o ausencia de una partícula que vaya hacia el nodo en cada uno de los 6 posibles caminos o enlaces más la posible existencia de una partícula que esté situada en el propio nodo. La regla de cambio de estado define la configuración de salida, es decir, la presencia de partículas moviéndose desde un nodo hacia sus adyacentes, así como la presencia de una partícula estacionaria, es decir, residente en el propio nodo con velocidad nula; en el caso de una retícula triangular son suficientes 7 bits para describir las configuraciones de entrada ó de

salida. La función de transición no se toma arbitrariamente, pues debe conservar ciertas leyes de la mecánica: durante un choque, el número de partículas, el momento y a veces la energía total deben de conservarse. Debido a ello y a las invariancias de rotación de la función de transición dictadas por la simetría de la red, se establecen ciertas limitaciones cuando se escogen las funciones.

Existen además otras limitaciones que deben de tenerse en cuenta; así, los fluidos son isotrópicos y esta simetría se rompe cuando limitamos el movimiento de las partículas a las 6 direcciones de la retícula, pero esta limitación a nivel microscópico no debe dar lugar a una pérdida de isotropía a nivel macroscópico. Además, se debe de evitar crear "invariantes parásitos" ó cantidades macroscópicas que se conservan con las reglas de propagación a lo largo de los enlaces de la retícula pero que no son conservadas por la ecuación de Navier-Stokes; por ello, se escoge una retícula triangular de entre todas las posibles redes bidimensionales. Finalmente, la función de transición escogida debe de conservar las velocidades de la partículas incidentes excepto para las siguientes configuraciones de entrada:

- choque frontal entre dos partículas;
- choque frontal entre tres partículas;
- choque entre dos partículas, siendo una de ellas estacionaria;
- choque de dos partículas con un ángulo de  $120^\circ$  entre los vectores velocidad.

La figura 1-5(b) muestra la configuración final después de un paso de tiempo, teniendo en cuenta las limitaciones de la función de transición. También existen reglas para choques entre partículas y superficie de un obstáculo; por supuesto también es posible que dos partículas se encuentren en un enlace pero no hace falta tenerlo en cuenta ya que no hay diferencia entre un cruce simple y un choque con rebote.

La validación del modelo se realiza mediante comparaciones entre los resultados de simulaciones y las predicciones teóricas que pueden ser resueltas analíticamente y se ha logrado con éxito en el caso de coeficientes de propagación y atenuación de compresión planar y ondas de fricción.

El modelo FHP ha dado lugar a muchas variantes a partir de ser introducido por Frisch *et al.* en 1985. Se intentó pasar a 3 dimensiones pero es imposible ya que no se encuentran redes en 3 dimensiones en las que existan reglas de interacción sin invariantes parásitas: se pueden encontrar en 4 dimensiones y proyectar los resultados en 3 dimensiones pero se necesita un entorno de 24 nodos lo que requiere tablas de verdad enormes y por lo tanto mucho tiempo para calcularse (modelo FCHC). Para paliar los problemas de inestabilidades en fluidos, como en el caso de los modelos de llamas en Química-Física, se usan diferentes tipos de partículas en la red.

El mayor problema de los modelos de gas reticular es que necesitan una enorme capacidad de cálculo, y se requieren por lo tanto superordenadores como el CRAY, aunque pueden implementarse fácilmente paralelizándolos en máquinas más pequeñas como la Connection Machine; otra alternativa es la RAP, un prototipo creado especialmente con este propósito que es comparable a la CRAY1 siendo capaz de procesar varios millones de nodos por segundo lo que permite una visualización directa del flujo ya que emite 50 imágenes por segundo [74].

Desde un punto de vista tecnológico el uso de autómatas celulares para resolver problemas hidrodinámicos es uno de los que más futuro tienen debido a su posible uso en Aeronáutica ya que podrían usarse como "túneles de viento numéricos".

## 1.3 Modelización de la contaminación marina

### 1.3.1 Modelización tradicional de vertidos de residuos al mar

En la naturaleza el transporte de la contaminación se realiza por medio de los fluidos geofísicos.

Cuando se realiza un vertido de contaminante a un fluido, bien directamente o a través de un emisario submarino, la dilución del contaminante es lograda por medio del arrastre. Mediante este mecanismo la pluma ó el chorro que se forma incorpora parte del material ambiente sobre ella misma; puede describirse como el proceso mediante el que el fluido fluye hacia el interior de la pluma a través de su superficie exterior. Dependiendo del fluido ambiente y de las características del efluente se pueden dar tres diferentes situaciones: a) un chorro puro que experimenta flujo de momento pero no de flotación, b) un chorro flotante ó una pluma forzada, que posee tanto flotación como momento y c) una pluma pura que experimenta solamente flujo de flotación.

Uno de los parámetros más importantes en la modelización de la dilución es el número densimétrico de Froude  $F_D$ , que se define como la proporción entre las fuerzas inerciales (ó de momento) y las fuerzas de flotación. Se define como

$$F_D = u_0 / (g'_0 D)^{1/2}$$

siendo  $u_0$  la velocidad de descarga a través de la boca del emisario,  $D$  su diámetro y  $g'_0$  la aceleración reducida de la gravedad;  $g'_0$  es igual a  $g(\rho_a - \rho_0) / \rho_a$  siendo  $\rho_0$  la densidad del efluente,  $\rho_a$  la densidad ambiente y  $g$  la aceleración de la gravedad. Cuánto mayor sea la velocidad del efluente y menor la aceleración reducida, existe una mayor probabilidad de que el efluente sea tipo chorro (es decir, con un número de Froude alto) en vez de una pluma simple, la cual

posee un número de Froude bajo.

Cuando un effluente contaminante es vertido en otro fluido ambiente, se establecen 3 zonas de dilución, llamadas de campo cercano, intermedio y lejano en función de su distancia al punto de vertido. La zona de mezcla más cercana, también llamada zona de mezcla inicial, contiene la zona de establecimiento del flujo y la zona de flujo establecido. Esta zona, donde ocurre toda la mezcla inicial debida a la disipación de energía cinética, es la más afectada por la forma en que se diseñe la boca de salida y dentro de la cual no se cumplen los estándares de calidad del agua. Algunas formas de flujo producen una zona intermedia entre los campos cercanos y lejanos y esta región representa una transición entre un flujo de chorro vertical y un movimiento de expansión horizontal. La estructura del flujo está caracterizada por movimientos horizontales y un rozamiento interfacial. La zona o campo lejano está caracterizada por una difusión pasiva y una advección producida por las corrientes y oleaje. Las propiedades del fluido y las diluciones están gobernadas solamente por factores medioambientales.

Al igual que en el caso del transporte de momento en los dominios geofísicos, en el transporte de masa, la hipótesis de un flujo cuasi-horizontal es válida siempre que estemos alejados de la fuente del vertido. En el campo cercano el fenómeno puede ser de naturaleza tridimensional (ej., una pluma flotante desarrollándose a partir de un effluente contaminante submarino) pero en el campo lejano el movimiento horizontal prevalece sobre el vertical. En el campo lejano el fenómeno puede ser bidimensional en el sentido horizontal y se pueden distinguir dos casos extremos.

En el primero, se logra (ó se supone) una homogeneización adecuada del contaminante en vertical debida a una mezcla vertical intensa. De esta forma se puede aplicar la teoría de la dispersión en una ó dos dimensiones. En el segundo

caso, el contaminante, debido principalmente a los fuertes efectos de flotación (aceite en agua ó efluente en un ambiente estratificado), está concentrado en una capa delgada a una profundidad específica conocida (superficie ó interfaz) y el fenómeno puede considerarse como evolucionando en el espacio en dos dimensiones. En el primer caso el modelo tiene que escribirse con respecto a la concentración a la profundidad media mientras que en el segundo se hace con respecto a la concentración local, referida a una zona específica a una determinada profundidad y una anchura específica conocida [47].

Como ya se mencionó anteriormente, el transporte de la contaminación ocurre debido a dos mecanismos físicos diferentes: la advección y la difusión. El primero describe el arrastre del material contaminante por el flujo ambiental y su transporte por el fluido, bien en disolución ó en suspensión, con velocidad igual a la del fluido (suponiendo despreciable la resistencia al flujo). El segundo mecanismo describe, en el caso de flujo laminar, el movimiento Browniano de las moléculas de contaminante, resultando en un aumento continuo del área ocupada por el contaminante. En el caso de flujo turbulento, los movimientos a nivel molecular se pueden despreciar ante el proceso similar de arrastre de masas de contaminante en remolinos turbulentos, lo que lleva al mismo resultado pero a una velocidad mayor.

La tasa de difusión, incluso en el caso de flujo turbulento, puede describirse mediante el coeficiente de difusión, de acuerdo con la aproximación de Boussinesq. Se llama coeficiente de difusión turbulenta ( $D$ ) y es análogo al coeficiente de viscosidad turbulenta y algunos órdenes de magnitud mayor que el coeficiente de difusión molecular siendo función en general de la hidrodinámica del fluido que transporte al contaminante.

La proporción mediante la cual los dos mecanismos de advección y difusión contribuyen al transporte final del contaminante está cuantificada mediante

el número de Péclet ( $Pe = uL/D$ ) donde  $u$  es la velocidad característica del fluido y  $L$  la longitud característica del dominio de flujo. Los valores de  $Pe$  de orden  $O[Pe] > 1$ , es decir, aquéllos en que el arrastre debido al fluido es mayor que el coeficiente de difusión turbulenta, demuestran que la advección domina a la difusión.

Finalmente, hay que realizar una distinción en el análisis de los procesos físicos involucrados en el transporte de contaminantes dependiendo de si los contaminantes son conservativos ó no. Si la masa total de contaminante es conservada durante su transporte, será conservativo; pero si la descarga en el fluido receptor inicia procesos de tipo físico, químico ó biológico (aumento ó disminución biológica de bacterias, reacciones químicas con el medio ambiente, asentamiento de moléculas de contaminante for floculación) que tienen como consecuencia un aumento ó disminución de su masa inicial, entonces será no conservativo.

### 1.3.2 Modelización Propuesta

La modelización de la costa se realiza mediante un dominio  $\Omega$  dividido en subdominios  $\Omega_m$  y  $\Omega_p$ , con  $\overline{\Omega}_m \cap \overline{\Omega}_p = \gamma$ , donde  $\gamma$  es una curva simple que modeliza la frontera entre la tierra y el mar, en los que se definen sendas variables: la variable  $c_m$  representa la calidad medioambiental del mar y  $c_p$  nos indicará el uso de la tierra representada por el aumento en el número de habitantes que viven, trabajan ó usan la costa en beneficio propio ó ajeno [58].

Se parte de que ambas variables siguen las dinámicas dadas por ecuaciones diferenciales parabólicas de la forma:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D\Delta c_i + f_i, \quad i = m, p. \quad (1.1)$$

donde  $f_i$  es una función por lo general no lineal. Haciendo explícita la dependencia de  $f_i$  de las variables, se tiene:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + f_i(c_m, c_p, \nabla c_m, \nabla c_p), \quad i = m, p. \quad (1.2)$$

Debido a la generalidad de  $f_i$ , este modelo es muy complicado para analizarlo matemáticamente. Las ecuaciones de la forma (1.1) capturan las características medias de la evolución de las variables que intervienen de tal forma que el transporte y los fenómenos interactivos están modelizados mediante  $f_i$  y la difusión mediante el término  $D_i \Delta c_i$ . Nótese que para un obtener un modelo simple se ha optado por considerar las difusividades  $D_i$  constantes, lo cual no siempre será realista. Estrictamente, el término de difusión debería ser del tipo

$$\text{div}(D_i(-)\Delta c_i)$$

donde  $D_i$  puede depender de gran cantidad de variables. La idea subyacente es que el término verdaderamente interesante es el de reacción,  $f_i$  (recordemos que estas ecuaciones se llaman "ecuaciones de reacción-difusión"), que, debido a la forma en que se representa, incorpora también la advección, si existe. Si se toman formas específicas de  $f_i$  relacionadas con los sistemas predador-presa, existe una teoría muy extensa y gran cantidad de algoritmos numéricos pero en estas aproximaciones no se consideran las relaciones espaciales.

En los sistemas del tipo (1.2) la dependencia espacial es muy importante ya que a pesar de que  $c_m$  y  $c_p$  tienen diferentes dominios de definición, existen **dominios de influencia** para cada variable dentro del dominio de la otra. Así, por ejemplo, si  $x \in \Omega_p$ , el uso de la tierra en  $x$  depende de la calidad del agua en algún  $x' \in \Omega_m$  y las  $x'$  que tengan esta propiedad forman un conjunto que depende funcionalmente de la  $x$ . La naturaleza de esta dependencia es la

responsable de la complejidad del problema, lo que hace muy difícil tratarlo mediante técnicas matemáticas tradicionales.

Si ponemos el sistema (1.2) de tal forma que incorporamos el fenómeno de transporte en un **parámetro de control P**, tendrá la forma

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + f_i(c_m, c_p, \mathbf{P}); \quad i = m, p.$$

cuyo comportamiento medio bajo condiciones adecuadas puede ponerse como

$$\frac{dc_i}{dt} = F_i(c_m, c_p, \mathbf{P}), \quad i = m, p.$$

La evidencia experimental nos demuestra que las variables evolucionan en escalas de tiempo muy diferentes. La calidad del agua del mar  $c_m$ , debido a los efectos tampón que se producen en los flujos biogeoquímicos, es una variable **lenta** a pesar de que su evolución puede sufrir cambios bruscos si se sobrepasan ciertos valores umbral; cuando esto ocurre, los procesos aeróbicos dan paso a los anaeróbicos y la calidad del agua decrece rápidamente. Sin embargo, el uso de la tierra  $c_p$  presenta una historia corta con un crecimiento muy activo con lo que se toma como una variable **rápida**. Así, inicialmente en una costa poco poblada se tendrá una buena calidad de agua lo que provocará un aumento en el uso de la costa adyacente, pero puede ocurrir que un crecimiento demasiado rápido del número de habitantes en la costa dé lugar a una producción descontrolada de residuos, lo que podría hacer sobrepasar la capacidad tampón de los procesos naturales y por lo tanto se producirá a su vez una disminución rápida de  $c_m$ ; además, con un aumento de la mala calidad del agua, se producirá después de un cierto lapso de tiempo (en zonas turísticas del orden de 2 años) una disminución drástica de la calidad en tierra  $c_p$ .

Parece lógico, por tanto, que la modelización matemática de la interfaz mar-

tierra ó costa se realice mediante sucesivas modificaciones de un modelo sencillo de partida; a pesar de ello, la estimación de parámetros va a ser problemática debido a diversos motivos, algunos de los cuales se mencionan a continuación:

a) Cuando los indicadores ambientales muestran valores anormales, ya se ha perturbado seriamente el comportamiento del sistema.

b) La estimación cuantitativa puede verse afectada negativamente por la presión de la normativa legal o por las manifestaciones de la opinión pública.

c) Existen muchas interacciones que no pueden considerarse y puede aparecer un comportamiento debido al "ruido".

Con el fin de obtener las pautas de estructura globales en este tipo de problemas se tendrá que usar un algoritmo del tipo

$$E_t = G(E_{t-1}, P(t))$$

donde se puede describir el estado espacial del sistema en el tiempo  $t$  como una función del estado espacial en  $t - 1$  y una actualización del parámetro vector en cada paso de tiempo.

Por lo tanto, parece posible que este modelo pueda implementarse mediante un autómata celular ya que cada paso en el tiempo el resultado va a ser función solamente del estado del sistema en el paso temporal anterior y que evolucionará por medio de una función de transición, representada en este caso por el parámetro vector.

### 1.3.3 Un modelo matemático tradicional

El modelo matemático para el transporte de contaminantes se escribe con respecto a la función escalar "concentración de contaminante",  $c(x, y, z, t)$ . La concentración se mide bien como volumen del contaminante ó bien como

unidades de contaminante por unidad de volumen del fluido (algunos ejemplos son ppm, mg/l, número de *Escherichia coli* por litro). El modelo consiste en una ecuación que describe la conservación de la masa del contaminante durante su movimiento, suponiendo que la ley de Fick y la aproximación de Boussinesq son válidas en el caso de flujo turbulento. Realizando un balance de la masa que entra y que sale a través de dos secciones de un flujo unidimensional de velocidad  $u$  tendremos

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \lambda c$$

que en caso de contaminación costera y en un modelo de transporte de dos dimensiones promediado en profundidad, es decir, en un modelo de transporte en una capa horizontal, toma la forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (CU)}{\partial x} + \frac{\partial (CV)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) - \lambda C$$

dónde  $D_x$  y  $D_y$  son los coeficientes de dispersión,  $\lambda$  la degradación bacteriana y  $U$ ,  $V$  son las velocidades promediadas en profundidad. Se completa el modelo con las condiciones de contorno y la(s) fuente(s) de contaminación.

Las soluciones numéricas de esta ecuación en derivadas parciales de tipo mixto (hiperbólica + parabólica) tienen sus mayores problemas en el control de los errores numéricos que entran a formar parte de la solución en forma de dispersión ó difusión numérica. Las formas explícitas de los esquemas en diferencias finitas están sujetas a criterios de estabilidad expresados como relaciones entre los pasos de discretización  $\Delta x$ ,  $\Delta t$ , mientras que las formas implícitas son numéricamente estables para todo  $\Delta x$  e  $\Delta t$ .

En el caso lineal, se puede aproximar una ecuación unidimensional y demostrar que hay varios esquemas en diferencias finitas que pueden aproximar

una onda de contaminación lineal, pero ello da lugar a errores de difusión y de dispersión que algunas veces enmascaran la solución y además solamente se encuentran soluciones para el campo lejano. Una alternativa es realizar la descripción del proceso desde un punto de vista Lagrangiano en vez de Euleriano, ya que en este caso podremos seguir al contaminante tanto en el campo próximo como lejano.

La descripción Lagrangiana requiere el seguimiento continuo de todas las partículas en que puede discretizarse el contaminante en suspensión ó diluido, con el objeto de calcular la concentración local como el límite  $\lim_{\partial\Omega \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial \Omega}$  donde  $\partial m$  es la masa de contaminante y  $\partial \Omega$  es el volumen de dilución. El número de estas partículas es infinito (en el sentido de que se ha aproximado idealmente el fluido por un continuo en el proceso modelizador) pero puede ser aproximado adecuadamente mediante un número finito tan grande como lo permita el ordenador.

En una descripción Lagrangiana los tres procesos anteriormente nombrados se simulan de la siguiente manera: la advección es realizada por la velocidad local del fluido, la cual se calcula a partir de las coordenadas de la partícula de contaminante interpolando a partir de los valores del entorno y hallando las coordenadas de la partícula después de ese paso de tiempo usando la cinemática elemental. La descomposición, si la sustancia es no conservativa, se simula eliminando del dominio de flujo un número de partículas escogido aleatoriamente pero relacionado con el factor de degradación bacteriana o reacción  $\lambda$ . La difusión es simulada mediante un movimiento de partículas Browniano al azar; la correspondencia entre el movimiento aleatorio y la difusión es realista físicamente y su cuantificación fue demostrada por Einstein a principios de siglo.

La simulación de estos tres procesos permite seguir el devenir de un gran

número de partículas discretas de modo que su evolución global se aproxima al comportamiento del contaminante. Si se requiere conocer la concentración en un lugar determinado, puede calcularse a partir del número de partículas que están contenidas en un espacio fijo. A partir de la descripción Lagrangiana parece ser que el proceso que requiere un análisis más detallado es la simulación de la difusión.

Para describir cómo se realizaría la simulación numérica de la difusión, recordemos el caso unidimensional descrito por la ecuación del calor en la recta infinita

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

con la condición inicial  $c(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . La solución  $c(x, t)$  tiene forma Gaussiana y existe una relación entre la varianza de esa distribución y el coeficiente de difusión

$$\sigma_x^2 = 2Dt$$

Si asumimos un gran número de partículas que tienen el mismo origen en  $t = 0$  y que realizan caminos aleatorios de longitud  $\Delta x$  (siguiendo la distribución binomial) en un tiempo  $\Delta t$ , de acuerdo con el teorema central del límite se obtendrá como promedio que su posición a lo largo del eje  $x$  sigue una distribución normal de varianza

$$\sigma_x^2 = \Delta x^2 \frac{t}{\Delta t}$$

donde igualando las expresiones de la varianza se obtiene que

$$\Delta x^2 = 2D\Delta t$$

ó lo que es lo mismo

$$\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 = U^2 = \frac{2D}{\Delta t}$$

ya que  $U$  puede interpretarse como la velocidad de las partículas que ejecutan un camino aleatorio. Esta ecuación establece una relación entre el coeficiente de difusión y la velocidad de las partículas que se mueven aleatoriamente; la generación de valores de la velocidad al azar, sujeto a ciertas hipótesis estadísticas se realiza mediante un muestreo usando el método de Monte Carlo.

La técnica Lagrangiana para simular la evolución de la concentración de un contaminante tiene una importancia especial para números de Péclet altos, es decir, cuando la advección domina sobre la difusión; la exactitud de los resultados aumenta conforme lo hace el número de partículas: sigue siendo necesario como mínimo seguir varios cientos de partículas.

### 1.3.4 Un modelo matemático alternativo

Partiremos de una playa que haya sufrido una gran evolución en la cantidad de turismo, lo que ha provocado un aumento en la contaminación de origen humano. Así, habrá habido principalmente un aumento de los residuos de origen doméstico pero además el aumento en el número de visitantes habrá hecho aparecer en la zona costera próxima un gran número de industrias derivadas del turismo que antes no existían; algunos ejemplos serían las de hostelería, ocio en el mar, construcción, alimentación y transporte que a su vez van a producir gran cantidad de desechos que finalmente acabarán en el mar.

Supondremos que siendo la costa (mar y playa) el principal motivo del aumento de población, las aguas residuales no se verterán directamente al mar y si se hace, lo sea en áreas alejadas de la playa; la tendencia actual es que tras un tratamiento adecuado de depuración, se hagan llegar al mar por medio de un emisario submarino que se adentrará la distancia precisa para evitar la

contaminación de las aguas de baño.

Como ya se mencionó anteriormente, un sistema de ecuaciones en derivadas parciales de tipo parabólico expresará la variación temporal de la calidad del agua (concentración de contaminante) y de la calidad de la playa (buen uso del suelo) y el segundo miembro de cada ecuación estará formado por dos términos. Así, en el caso del mar el primer término corresponderá a la advección, que al ser el transporte debido al movimiento medio del fluido será la velocidad por el gradiente de concentración, y el segundo representará la difusión molecular que seguirá una ecuación proveniente de las leyes de Fick, que consiste en el producto de la difusividad por la laplaciana de la concentración; es evidente que tanto la velocidad del fluido como la difusividad no se mantienen constantes en el fluido, aunque como se apuntó antes, conviene tomar la difusividad como una constante.

Ahora bien, debido a la canalización de las aguas residuales, la evolución del buen uso del suelo va a venir dado por la cantidad de contaminante que se vierte al mar. Es decir, que originariamente cuando se pasa de una playa virgen a una playa de uso frecuente, se puede analizar el asentamiento de la población y la repercusión que su asentamiento tiene en la cantidad de contaminante vertido (tal sería el caso al inicio del turismo en la playa de Maspalomas aunque entonces las aguas residuales no estaban canalizadas y su vertido se hacía incontrolada e indiscriminadamente). Hoy día, la variación del uso de la playa es estacional tanto en su cantidad de población como en el tipo de uso (diario, apartamento alquilado, foráneos ó nacionales..) y por lo tanto la calidad de uso del suelo ya no vendrá representada directamente por la variación del número de usuarios de la costa sino a través de la variación en la cantidad diaria de vertidos y en el tiempo y la frecuencia de dichos vertidos. Por lo tanto, la ecuación de variación de la calidad del suelo va a

substituirse por la variación de la cantidad de contaminante vertido, la cual será introducida en la ecuación de advección-difusión para el mar como una condición inicial si es un vertido puntual y que puede reinicializarse en cada paso de tiempo ó cada cierto periodo si el vertido es continuo ó a pulsos.

En una ecuación de reacción-difusión que modeliza un vertido de contaminante al entorno marino, el término de reacción representa la desaparición de partículas de contaminante debido a los diferentes procesos físicos, químicos y biológicos. La degradación bacteriana es el fenómeno que hace desaparecer la mayor parte del contaminante y se mide normalmente mediante un índice llamado  $T_{90}$ —período que es necesario para desactivar el 90% del número inicial de organismos— aplicado a la contaminación representada por el número de coliformes totales y fecales por cada 100 ml de agua. Si bien este índice depende de varios parámetros (insolación, temperatura, salinidad, etc.) y por lo tanto sufre una variación estacional, en este modelo se va a considerar constante por encontrarnos en una zona subtropical en la que la insolación solar es alta durante todo el año (BOE núm.178, 27/7/93). El uso de los valores de coliformes como indicadores de bacterias para cuantificar el grado de contaminación por material fecal de las aguas naturales está justificado debido a las altas densidades de organismos de este tipo que se encuentran en las aguas residuales y a su facilidad para contarlos; por lo tanto, sirven para definir la calidad de las aguas de baño según los requerimientos microbiológicos de la CE [60]. Por ello, cuando en este trabajo se hable de contaminante nos referiremos al número de coliformes fecales y totales, ya que son éstas algunas de las medidas que se toman mensualmente en las playas para garantizar la calidad del agua (BOE núm.167, 13/7/88).

Es evidente que la probabilidad de desaparición de una partícula de contaminante será mayor cuanto más alejada esté del punto de vertido, si bien esa

probabilidad vuelve a hacerse más pequeña si la partícula ha viajado durante mucho tiempo. Por lo tanto el factor de degradación bacteriana dependerá de la distancia y/o del tiempo recorrido, considerando que esta dependencia sigue una distribución normal.

Sea por lo tanto la ecuación no lineal del tipo reacción-difusión para el mar,

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = \vec{v} \cdot \nabla c_m + D_m \nabla^2 c_m - \lambda(x) c_m$$

con  $c_m = c_m(\xi_m, \xi_p)$  y  $D_m = D_m(\xi_m, \xi_p)$  definidas como funciones de conjunto en dominios disjuntos  $\Omega_i$  del plano  $R^2$ .

La simulación de esta ecuación se va a intentar realizar construyendo un autómata celular de tipo gas reticular que sea capaz de reproducir el comportamiento macroscópico esperado de una ecuación de ese tipo.

## Capítulo 2

# Introducción a los modelos de autómatas celulares en hidrodinámica: Gases reticulares

### 2.1 Teoría general de autómatas para fluidos ideales

Las ecuaciones en derivadas parciales han sido, clásicamente, la base de los modelos matemáticos para sistemas continuos, como los fluidos. Solamente en circunstancias bastante simples se pueden encontrar soluciones matemáticas exactas para estas ecuaciones, por lo que la mayoría de los estudios actuales sobre dinámica de fluidos se centran en simulaciones realizadas en ordenadores digitales mediante aproximaciones discretas de las ecuaciones en derivadas parciales originales.

Las redes de autómatas celulares pueden considerarse como una aproximación alternativa para modelizar fluidos y otros sistemas continuos. Sus celdillas constituyentes básicas son discretas y son por lo tanto ideales para simulaciones en ordenadores digitales; un número alto de estas celdillas puede reproducir un comportamiento global que representa algo continuo. Así, escogiendo adecuadamente las reglas de evolución de cada celdilla individual, el comportamiento global obtenido debería seguir el descrito por las ecuaciones en derivadas parciales para fluidos [78].

Las redes de autómatas celulares para fluidos son modelos idealizados que representan el movimiento y colisión de las partículas microscópicas del fluido. Como se debe de esperar de la segunda ley de la termodinámica, las configuraciones dadas de partículas se aleatorizan rápidamente y se puede considerar que alcanzan alguna forma de equilibrio. Dentro de este equilibrio resulta adecuado describir las configuraciones simplemente en forma de probabilidades que dependen de unas pocas cantidades microscópicas—como pueden ser el momento y el número de partículas—y que se conservan en las interacciones microscópicas entre partículas. Dichas cantidades macroscópicas promediadas cambian muy lentamente en relación con la tasa de interacciones entre partículas. Debido al comportamiento de las ecuaciones diferenciales, éstas se pueden obtener a partir de las ecuaciones de transporte para la dinámica media de partículas microscópicas.

La descripción del comportamiento hidrodinámico a partir de la dinámica microscópica nunca ha sido enteramente rigurosa, y las redes de autómatas celulares pueden considerarse como un ejemplo simple en el que tanto las hipótesis necesarias como las aproximaciones efectuadas pueden estudiarse en detalle. El soporte para llegar a las conclusiones proviene de las simulaciones explícitas de los modelos de autómatas celulares para fluidos y de la com-

paración de los resultados con los obtenidos experimentalmente. Un ejemplo ilustrativo es la difusión; a nivel microscópico, la difusión surge como consecuencia de los movimientos de partículas al azar y solamente son necesarias reglas simples para reproducirla mediante un autómata celular. La obtención de la ecuación de difusión requiere que se conserve el número de partículas pero no es necesario que se conserve su momento total; lo que se debe realizar, precisamente, es una aleatorización de las direcciones de las partículas en cada nodo, tal como se describe en [79]. De esta manera se puede pensar en modelos de autómatas celulares para simular la solución de la ecuación de difusión, que a su vez permite llegar a un método de relajación para resolver ecuaciones como la de Laplace, Poisson o parecidas. Siempre que la base física de las ecuaciones en derivadas parciales conlleve un gran número de partículas u otros componentes con interacciones locales, se puede esperar encontrar un modelo efectivo de autómata celular.

A nivel teórico, los modelos de fluidos basados en autómatas celulares pueden analizarse con los mismos métodos de mecánica estadística usados para obtener las ecuaciones de Navier-Stokes de la física de fluidos a partir de la dinámica microscópica de las moléculas reales [80]. Estos modelos pueden aproximarse usando la teoría cinética para hallar ecuaciones de transporte para las densidades medias de las partículas con una dirección y posición particular: en el límite hidrodinámico, estas densidades medias microscópicas se aproximan mediante un desarrollo de Chapman-Enskog en términos de las densidades y velocidades macroscópicas del fluido. Las ecuaciones resultantes para estas cantidades microscópicas se corresponden con las ecuaciones habituales de Navier-Stokes pero, al igual que para un fluido real, el modelo de autómata celular contiene correcciones definitivas de mayor grado que, sin embargo, no aparecen en las ecuaciones de Navier-Stokes. Ello se debe a que la

sencillez de los modelos a base de autómatas celulares hace posible obtener adicionalmente correcciones de orden más alto que las proporcionadas por las ecuaciones de Navier-Stokes para los fluidos continuos que provienen de un desarrollo de hasta orden 2 y por lo tanto solamente son adecuadas cuando el módulo de la velocidad es mucho más bajo que la velocidad del sonido ( $c$ ), es decir, infrasónico<sup>1</sup> [78]. Además, los métodos analíticos proporcionan solamente valores aproximados para parámetros como la viscosidad, ya que los valores exactos deben ser obtenidos mediante simulaciones explícitas en el ordenador.

Las descripciones estadísticas de los modelos de fluidos mediante un autómata celular se asemejan a las aproximaciones mediante diferencias finitas explícitas para las ecuaciones en derivadas parciales; en ambos casos, a cada lugar de una rejilla se adjudica un valor de una variable continua que describe la densidad y velocidad media del fluido en ese punto. Cuando se realizan cálculos mediante el método de diferencias finitas, la variable se suele representar directamente como un número en coma flotante; en el método del autómata celular, la variable puede ser vista mediante una representación probabilística o estadística.

De acuerdo con el desarrollo normal de la mecánica estadística, una descripción estadística del autómata celular de un fluido puede obtenerse como una media sobre un conjunto de configuraciones posibles de partículas microscópicas; en la práctica, se sigue la evolución de una sola configuración

---

<sup>1</sup>Cuando estemos en un régimen supersónico ( $\vec{v}/c \geq 2$ ), los choques se hacen tan fuertes y finos que no pueden aplicarse en detalle las descripciones continuas de los fluidos físicos; y en estos casos la estructura de los choques solo puede ser encontrada aparentemente considerando una dinámica de partículas explícita. Sin embargo, si tenemos un régimen de flujo transónico ( $\vec{v} \approx c$ ) pueden usarse las ecuaciones continuas pero habrá que realizar correcciones sobre las ecuaciones habituales de Navier-Stokes. Un tipo de corrección puede hallarse, en principio, manteniendo los términos de orden  $O(v^3)$  y mayores en el desarrollo de Chapman-Enskog.

microscópica específica. Sin embargo y siguiendo una hipótesis fundamental de la mecánica estadística—la teoría de la ergodicidad—, se espera que unas medias espacio-temporales apropiadas de esta configuración específica darán resultados parecidos a los que se obtendrían haciendo la media de todo el conjunto de configuraciones posibles.

Esta interpretación permite una comparación entre autómatas celulares y aproximaciones discretas de ecuaciones en derivadas parciales; en este último caso las variables representan propiedades medias conjuntas y se sigue su evolución con precisión, mientras que en el caso de autómatas celulares se considera el conjunto solamente en un momento dado y se obtienen las propiedades macroscópicas como medias explícitas de variables microscópicas. Si se consideran válidas las hipótesis fundamentales de la Mecánica Estadística, se espera que el método de las redes de autómatas celulares no sea menos eficiente que el método de diferencias finitas porque mucha de la información usada en el caso de diferencias finitas es sin duda irrelevante para el comportamiento macroscópico de interés.

Para definir un autómata, la primera discretización necesaria es la del tiempo; de aquí en adelante el tiempo deja de ser una variable continua, como ocurre normalmente en Física, y se subdivide en intervalos de tiempo idénticos que se numeran de 1 a  $n$ . Las variables representadas por los autómatas se actualizan en cada intervalo de tiempo y entonces parece correcto representar el tiempo mediante números enteros  $t = \{0, 1, 2, 3, \dots, n, \dots\}$ . La segunda operación de discretización es reemplazar las variables continuas y las ecuaciones diferenciales por autómatas de estado finito. En Computación, para definir un autómata se necesitan 3 conjuntos discretos:

1. El conjunto de *entradas*  $i$ ,  $\mathbf{I}$
2. El conjunto de *estados internos*  $s$ ,  $\mathbf{S}$  y

3. El conjunto de *salidas*  $o$ ,  $\mathbf{O}$ ,

y dos aplicaciones:

1. *La función de cambio de estado*  $S(i,s)$ , que es una aplicación de la entrada y el estado en el tiempo  $t$  en el nuevo estado en el tiempo  $t+1$ , y

2. *La función de salida*  $O(i,s)$ , que es una aplicación de la entrada y el estado en el tiempo  $t$  en la salida en el tiempo  $t+1$ .

En el caso general puede haber muchas entradas, estados internos y salidas y por lo tanto  $S$  y  $O$  serán funciones de los vectores  $i$ ,  $s$  y  $o$ ; lo importante es que estas variables deben ser discretas y por lo tanto pueden ser representadas por enteros ó grupos de enteros. Así,  $k$  es el número de entradas posibles de un autómata y es lo que se conoce por **conectividad de entrada** de ese autómata [73].

La definición anterior de autómata puede simplificarse usando los conjuntos de entrada y salida y definiendo una *función de transición* que calcule la salida en el tiempo  $t+1$  como función de las entradas y en algunos casos también del estado interno (es decir, la salida) en el tiempo  $t$ ; otra simplificación es suponer solamente 2 estados (0 y 1 por ejemplo) como es el caso de los autómatas binarios. Algunos autómatas binarios conocidos son los que utilizan el álgebra de Boole con funciones de transición lógicas del tipo AND, OR y XOR ó los autómatas llamados de umbral en los que la función de cambio de estado viene definida por

$$x(t) = Y \left[ \sum_j T_j x_j(t-1) - \Theta \right]$$

en donde  $Y$  es la función de Heaviside (que es igual a 1 si el argumento es mayor ó igual que 1 y 0 en los demás casos). La suma se calcula sobre todas las entradas dadas por  $j$ ,  $T_j$  es el peso de la entrada  $j$  y la función de cambio de estado es una función de Boole que está determinada por la forma en que

se escojan los pesos  $T_j$  y el umbral  $\Theta$ .

Las redes de autómatas pueden ser consideradas como sistemas de ecuaciones diferenciales que han sido simplificadas mediante discretización. La discretización en el tiempo corresponde a una transformación de la ecuación diferencial en una ecuación de diferencias finitas de forma que  $\frac{dx}{dt} = f(x, y)$  se transforma en  $x(t+1) = x(t) + f(x(t), y(t))$ . El siguiente paso consiste en reemplazar todas las variables reales  $x$  e  $y$  por variables binarias o autómatas. El operador  $1+f$  de la ecuación en diferencias finitas se transforma en una función de cambio de estado booleana del autómata  $x$  con dos entradas  $x$  e  $y$ .

Las redes de autómatas celulares aplicadas a la modelización de la hidrodinámica de fluidos se conocen generalmente como autómatas de gas reticular o AGR (lattice gas automata o LGA en la literatura inglesa).

## 2.2 Modelos de gas reticular en fluidos simples

En estos modelos, el término *gas reticular* representa un sistema de partículas que se mueven de un lugar a otro de una red regular con velocidades predeterminadas elegidas en un conjunto finito pequeño de posibles velocidades. Este tipo de gas reticular representa de alguna forma una generalización de los modelos clásicos de gases reticulares usados, por ejemplo, en los modelos teóricos de la transición líquido-gas [64]. La mayor diferencia existente entre los nuevos modelos de gases reticulares, comparados con los clásicos, es dinámica, ya que en los nuevos modelos existe una conservación explícita de momento, por lo que se podrán obtener ecuaciones hidrodinámicas del movimiento. Ello hace que los modelos de gases reticulares que conservan el momento sean de interés tanto en hidrodinámica como en mecánica estadística.

Desde el punto de vista hidrodinámico, ¿qué conlleva el hecho de que se conserve el momento en los gases reticulares? Simplemente, que se deben

discretizar simultáneamente el espacio, el tiempo, la velocidad y la densidad. La discretización del espacio y el tiempo es una práctica habitual cuando se buscan soluciones numéricas al resolver, por ejemplo, ecuaciones en derivadas parciales mediante el método de las diferencias finitas. La discretización de las velocidades es menos usada, siendo Broadwell quien primero la desarrolló para flujos hidrodinámicos, construyendo en 1964 un modelo para encontrar soluciones exactas a una ecuación de Boltzman que describía ondas de choque; su modelo era de velocidades discretas y continuo en espacio, en tiempo y en densidad [10].

El primer modelo con discretización de las velocidades usado en mecánica estadística fue propuesto por Kadanoff y Swift en 1968 [45] creando una versión del modelo clásico de Ising en un intento de demostrar la posibilidad teórica de la divergencia de los coeficientes de transporte cerca del punto crítico.

El modelo clásico de Ising consiste en una retícula regular cuyos nodos están ocupados por "spins" o elementos que pueden visualizarse como pequeños imanes que, al contrario de las partículas de un gas, ocupan posiciones fijas. Lo único que varía es su orientación en el espacio [67]; además poseen un momento magnético que puede orientarse en dos sentidos opuestos en su caso general,  $s_i = +$  o  $-$  en el eje de ordenadas, para  $i = 1, \dots, N$ . Los "spins", al comportarse como pequeños imanes, deberán ejercer fuerzas entre ellos en función de sus orientaciones, de las distancias y de la naturaleza del medio en el que están; en el caso de los sistemas Ising la analogía con los imanes se mantiene pero el acoplamiento se efectúa según consideraciones bastante abstractas, ya que no se tendrán en cuenta las fuerzas a gran distancia y, por lo tanto, solamente existe interacción entre los "spins" inmediatamente adyacentes. La energía de un sistema de Ising queda descrita por

$$\forall J > 0, \quad H = -J\sum' s_i s_j - H\mu\sum s_i$$

donde la prima sobre la primera suma significa sumar sólo sobre los primeros vecinos y  $\mu$  es el potencial químico [49]. La solución exacta en dos dimensiones fue elaborada por Lars Onsager en 1944 obteniendo que el modelo posee una transición orden-desorden a una temperatura crítica  $T_c = 2.269J/k_B$  siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann. Para temperaturas por debajo de la crítica aparece una magnetización espontánea incluso en ausencia de un campo exterior  $H$ .

En el modelo desarrollado en mecánica estadística, los "spins" positivos actuaban como partículas con momento en las cuatro direcciones del espacio (en el caso de una retícula cuadrada) y los "spins" negativos actuaban como agujeros. Se permitía que las partículas colisionaran unas con otras o que cambiaran sus posiciones con los agujeros, pero solamente si la energía (basada en las interacciones de Ising con el entorno inmediato) y el momento se conservaban exactamente. Fue un modelo puramente analítico obtenido discretizando en una ecuación maestra el espacio, las velocidades y las densidades, pero siendo continuo en el tiempo. Se obtuvo un resultado nuevo y muy interesante ya que a pesar de ser un modelo simple, demostró que se podía llegar de la dinámica a la hidrodinámica a través de la existencia de ondas sónicas.

El primer modelo totalmente discreto en hidrodinámica fue introducido por primera vez por Hardy *et al.* en los años 70 (conocido por el acrónimo de sus autores como modelo HPP) y consistía en partículas iguales que se movían de un lado a otro en una red cuadrada en tiempo discreto, conservando después de cada choque el número de partículas y el momento [33][34]. Su objetivo no fue la simulación hidrodinámica a gran escala, sino estudiar temas de interés en mecánica estadística, como pueden ser la ergodicidad o la divergencia de los

coeficientes de transporte en dos dimensiones; usaron el modelo más sencillo de dinámica molecular y sus resultados fueron notables por el grado de acuerdo entre las predicciones teóricas de las propiedades de transporte del modelo y los resultados empíricos obtenidos en sus simulaciones numéricas. El problema de este modelo radicaba en sus pocas aplicaciones porque su límite hidrodinámico era anisotrópico, lo que era consecuencia de las restricciones impuestas por suponer una red cuadrada; hasta 1986 no se dieron cuenta de que la forma de la red producía anisotropía y fueron Frisch *et al.* [23] (modelo FHP) los que extendieron el modelo de Hardy usando una red triangular, lo cual fue suficiente para lograr una hidrodinámica isotrópica.

Generalmente, las simulaciones por ordenador de los gases reticulares han sido realizadas para verificar predicciones teóricas sobre el comportamiento de los modelos o para explorar nuevas áreas de la hidrodinámica y de la mecánica estadística.

## 2.3 Descripción de un autómata de gas reticular

La idea fundamental de los gases reticulares consiste en sustituir la descripción molecular por una descripción mediante unas "pseudo-partículas" de diámetro nulo que se desplazan sincrónicamente a lo largo de las aristas de una retícula geométrica regular con velocidades que pertenecen a un conjunto discreto. Sincrónico quiere decir, que si todas las partículas están inicialmente sobre los nodos de la retícula, existe un tiempo dado (el tiempo de propagación) al cabo del cual todas las partículas estarán de nuevo sobre los nodos de la retícula. Por lo tanto, la partículas solamente pueden encontrarse sobre los nodos de la retícula a intervalos de tiempo regulares, en que tendrán lugar las colisiones

que definen la idea de gas.

La descripción completa de un gas reticular requiere que se definan los siguientes conceptos:

- **la geometría** de la retícula, que determina el conjunto de posiciones posibles e implica una *discretización* del espacio.

- **las propiedades físico-químicas** de las partículas presentes en la retícula. En la mayoría de los modelos solamente interviene en la dinámica la **masa** de las partículas y a menudo es la misma para todas las partículas. Sin embargo pueden crearse modelos que contengan partículas de masa diferente [12], de tipo químico diferente [17] o que posean propiedades electromagnéticas [35], [14], [15].

- **las reglas de desplazamiento** entre los nodos de la retícula para cada tipo de partícula. El conjunto de estas reglas —combinado con los datos del tiempo de propagación y la geometría de la retícula— determina las **velocidades** de las partículas y su impulso.

- **las reglas de colisión**, que deben de conservar las cantidades físicas locales y sólo esas para evitar la creación de invariantes no físicos. La posibilidad de un equilibrio termodinámico está ligada a la existencia de colisiones y son estas últimas las que van a determinar el conjunto de coeficientes de transporte y por tanto una aproximación a estados de equilibrio. Las colisiones son puramente locales, tienen los mismos invariantes que el grupo finito de velocidades y pueden conservar la masa, el momento y la energía.

Existe una simplificación suplementaria muy útil si se desea que las simulaciones de la evolución de un gas reticular sean lo más eficaces posibles: se impone un **principio de exclusión** impidiendo la presencia simultánea de varias partículas con la misma velocidad en el mismo nodo. No es una exigencia fundamental pero tiene varias ventajas:

- Permite representar la presencia o la ausencia de una partícula sobre cada canal mediante una sola cifra binaria o *bit* que únicamente tomará los valores 0 ó 1. Cada nodo de la red no está afectado por lo tanto más que por un número finito de estados y las operaciones de colisión pueden efectuarse exactamente con la ayuda de un pequeño número de operaciones lógicas o consultando una tabla. De hecho, las colisiones se escogen, evidentemente, de manera que satisfagan el principio de exclusión no introduciendo jamás la presencia de más de una partícula en un canal de la retícula. Se trabaja por lo tanto con un estado que tiene una palabra de  $b$  bits correspondientes a los canales existentes en cada nodo.

- Es también el principio de exclusión el que permite utilizar las redes de autómatas para realizar las simulaciones de los gases reticulares. Si no existiera, las poblaciones de partículas por canal podrían tomar valores arbitrariamente grandes, lo que necesitaría la utilización de números reales para representarlos en memoria durante las simulaciones, lo que a su vez implicaría un coste de memoria de hasta 64 veces más. Luego, introduciendo el principio de exclusión evitamos medidas de desbordamiento por acumulación de partículas así como la posibilidad de errores de redondeo a lo largo de los cálculos.

- El hecho de que los cálculos de evolución sean exactos por trabajar con operaciones lógicas sobre bits implica que las simulaciones de gases reticulares que incluyen un principio de exclusión son absolutamente estables y no poseen inestabilidades numéricas.

## 2.4 Propiedades generales de los AGR

Para definir con más precisión los modelos de gases reticulares, tendremos que usar algunas propiedades geométricas de las retículas (en general de una a

cuatro dimensiones) en las que están definidos. Concretamente, en el caso de estos modelos y dentro del campo de las redes cristalográficas, nos centraremos en la teoría de las retículas regulares de Bravais.

El término **retícula** denota un conjunto, generalmente equidistribuido, de puntos aislados  $\mathcal{L}$  en un espacio de  $D$  dimensiones  $R^D$  y se define el entorno de un punto de  $\mathcal{L}$  como un conjunto de puntos de la retícula "próximos" al dado elegidos según una regla claramente definida. Una **retícula de Bravais** es aquella que es invariante ante una traslación que lleve cualquier punto de  $\mathcal{L}$  sobre cualquier otro. Puesto en ecuaciones, hacemos que  $T_u$  sea una traslación del vector  $u$  en el espacio, escribiendo la definición

$$T_{x-y}\mathcal{L} = \mathcal{L} \tag{2.1}$$

para cualquier par  $(x, y)$  de puntos de  $\mathcal{L}$ . Una retícula es *periódica* si es invariante bajo un grupo de traslaciones. Puede probarse que en un espacio de  $D$  dimensiones, las retículas de Bravais son aquellas retículas periódicas generadas por combinaciones lineales de  $D$  vectores independientes  $\vec{u}_i$  con coeficientes  $n_i$  enteros (positivos o negativos) que forman el grupo de puntos  $n_1\vec{u}_1 + \dots + n_D\vec{u}_D$ .

Las retículas de Bravais se distinguen por sus propiedades de simetría. El grupo de simetrías puntuales,  $\mathcal{G}$ , de una retícula es el grupo de las transformaciones congruentes (o isometrías) que a) dejan fijo un punto de la retícula y b) dejan la retícula globalmente invariante. Existe siempre un pequeño conjunto  $S$  de nodos vecinos invariante bajo el grupo de simetría  $\mathcal{G}$  y que definen un grupo de vectores generadores. Este grupo de vecinos o entorno forma un polígono —si se trabaja en dos dimensiones— del que la retícula toma su nombre, de ahí que tengamos retículas monoédricas, cuadradas, rectangulares y hexagonales. Si se trabaja en tres dimensiones se tiene un poliedro y en cualquier

otra dimensión se obtiene un politopo [19]; es obvio que  $\mathcal{G}$  es también el grupo de simetría del politopo asociado con la retícula. Luego, una retícula regular de Bravais es una retícula de Bravais en la que el conjunto  $S$  es un politopo .

Para definir un gas reticular se necesita una **retícula regular de Bravais**  $D$ -dimensional  $\mathcal{L}$  en la que todos los vectores generadores tienen la misma longitud. Cada nodo de esta retícula puede ser representado como una combinación lineal de coeficientes enteros de  $D$  vectores generadores. La regularidad de la retícula es muy importante para tener las propiedades de isotropía necesarias para reproducir el comportamiento de la mecánica de fluidos. La conexión entre la simetría de la retícula y la isotropía a gran escala puede obtenerse de Rothman y Zaleski [63], donde demuestran que en las retículas regulares de Bravais se satisfacen todas las hipótesis de simetría tensorial necesarias para la obtención de la hidrodinámica de los gases reticulares sin isotropía; incluso prueban que algunas otras retículas también producen hidrodinámica con isotropía. La búsqueda de la isotropía motiva la restricción de todos los desarrollos a retículas regulares de Bravais; de entre las 5 posibles retículas de Bravais en dos dimensiones, solamente las retículas cuadradas y hexagonales son regulares.

En los modelos donde todas las partículas tengan el mismo módulo de velocidad, llamaremos  $\vec{c}_i$  a los vectores que unen un nodo con los del conjunto de vecinos más cercanos o entorno  $S$ ; los vectores  $\vec{c}_i$  poseen propiedades de simetría que son importantes en el cálculo de diversas cantidades.

La **posición**  $\vec{r}$  de un nodo será, por lo tanto, un vector con  $D$  componentes

$$\vec{r} = \{r_\alpha\} = (r_1, \dots, r_D). \quad (2.2)$$

y se utilizarán índices griegos para representar las componentes espaciales de los vectores de  $R^D$ .

Las **partículas** se consideran de masa 1, y como existen  $b$  canales por nodo, están afectadas de alguna de las velocidades  $\vec{c}_i$  (siendo  $i = 0, 1, \dots, b - 1$  o  $i = 1, \dots, b$ ); también pueden existir partículas con velocidad nula por motivos de implementación, por lo tanto, en general será:  $b = b_m + b_r$ , donde  $m$  representa el número de partículas móviles y  $r$  el de partículas en reposo. La **ocupación** de un canal vendrá dada por la presencia de una partícula en dicho canal, que le hará tomar el valor 1, ya que en caso contrario estará a cero. También pueden añadirse otras características a las partículas, tales como color, especie química, etc... .

Se asume además que existe un conjunto de  $b$  vectores velocidad  $\vec{c}_i$  de módulo  $|\vec{c}|$  con componentes espaciales  $\vec{c}_{i\alpha}$  ( $\alpha = 1, \dots, D$ ) que debe satisfacer algunas propiedades más:

- Cada subconjunto admisible del conjunto de velocidades posee el mismo grupo de simetría que la retícula. Ello significa que para todo par de velocidades  $\vec{c}_i$  y  $\vec{c}_j$  de la misma familia, es decir, con el mismo módulo, existe una isometría  $\mathbf{G} \in \mathcal{G}$  que transforma  $\vec{c}_i$  en  $\vec{c}_j$ . Recíprocamente, la imagen, bajo toda isometría de la retícula, de cualquier velocidad  $\vec{c}_i$  del conjunto de velocidades permitidas debe pertenecer al mismo conjunto. Es decir, que para cada par  $(\vec{c}_i, \vec{c}_j)$  existe un elemento en el grupo "cristalográfico"  $\mathcal{G}$  de isometrías que mantiene globalmente el conjunto de vectores velocidad que realiza la aplicación de  $\vec{c}_i$  en  $\vec{c}_j$ .

- Para todo punto  $\vec{r}$  de la retícula, todos los primeros vecinos de  $\vec{r}$  sobre la retícula son de la forma

$$\vec{r} + \vec{e}_i, \quad \vec{e}_i = \vec{c}_i \tau, \quad |\vec{c}_i| = 1 \quad (2.3)$$

siendo  $\tau$  el **tiempo de propagación** sobre la retícula, que se tomará como unidad de tiempo.

- El conjunto de las velocidades es suficientemente simétrico alrededor de cada velocidad particular. Esta propiedad se puede expresar de la forma siguiente: para una velocidad particular  $\vec{c}_i$ , sea  $\mathcal{G}_i$  el subgrupo del grupo  $\mathcal{G}$  de isometrías que deja  $\vec{c}_i$  invariante y por lo tanto también deja globalmente invariante el hiperplano  $\Pi_i$  ortogonal a  $\vec{c}_i$ . Se imponen las propiedades siguientes:

(i) No existe ningún vector no nulo que pertenezca a  $\Pi_i$  que sea invariante ante la acción de todos los elementos de  $\mathcal{G}_i$ .

(ii) Las únicas transformaciones lineales definidas en el subespacio  $\Pi_i$  que conmutan con todos los elementos de  $\mathcal{G}_i$  son proporcionales a la identidad.

Se verifica fácilmente que las propiedades anteriores se cumplen para cada uno de los modelos de gas reticular, según la demostración de [24]. Es necesario introducir a continuación una propiedad geométrica muy útil para el cálculo de cualquier tensor en el espacio descrito por la red  $\mathcal{L}$ : la invariancia con respecto al grupo  $\mathcal{G}$  de isometrías, una forma débil de isotropía. Un tensor de rango  $p$ ,  $\mathbf{T} = \{T_{\alpha_1 \dots \alpha_p}\}$  es invariante en  $\mathcal{G}$  si es invariante para toda isometría de  $\mathcal{G}$ . Un grupo de  $b$  tensores de rango  $p$ ,  $\{\mathbf{T} = \{T_{\alpha_1 \dots \alpha_p}\}; i = 0, \dots, b - 1\}$ , es invariante en  $\mathcal{G}$  si toda isometría de  $\mathcal{G}$  que transforma  $\vec{c}_i$  en  $\vec{c}_j$ , transforma  $\mathbf{T}_i$  en  $\mathbf{T}_j$ .

A partir de las 3 condiciones anteriormente descritas sobre la invariancia por  $\mathcal{G}$ , se pueden probar las siguientes propiedades de transformación, cuya demostración viene dada en [24]:

1.- Invariancia de paridad. El grupo de vectores velocidad es invariante bajo la reversibilidad espacial.

2.- Todo conjunto de  $b$  vectores invariantes  $\{\vec{v}_i\}$  en  $\mathcal{G}$  toma la forma  $\vec{v}_i = \varphi_i \vec{c}_i$  donde los  $\varphi_i$  dependen solamente del módulo de la velocidad  $\vec{c}_i$  correspondiente y no de su dirección.

3.- Todo conjunto de  $b$  tensores de rango 2 invariantes por  $\mathcal{G}$  es de la forma

$T_{i\alpha\beta} = \psi_i \overrightarrow{c_{i\alpha}} \overrightarrow{c_{i\beta}} + \chi_i \delta_{\alpha\beta}$  donde los  $\psi_i$  y  $\chi_i$  no dependen más que del módulo de la velocidad  $\overrightarrow{c_i}$  correspondiente y no de su dirección.

4.- Todo tensor de rango 2 invariante bajo  $\mathcal{G}$  es isótropo. Esta propiedad es consecuencia de la anterior porque el tensor  $\mathbf{T}_i$  es independiente de  $i$ .

5.- Todo tensor de rango 3 invariante por  $\mathcal{G}$  es nulo. Esto se debe al hecho de que sobre una retícula de Bravais, a toda dirección  $\overrightarrow{c_i}$  le corresponde una dirección opuesta  $-\overrightarrow{c_i}$ . El tensor deberá ser invariante por la reversibilidad del espacio, por lo tanto tendrá que ser nulo.

6.- Si se define el momento de orden  $p$  de las velocidades microscópicas como  $\sum_i \overrightarrow{c_{i\alpha_1}} \dots \overrightarrow{c_{i\alpha_p}}$ , se observa inmediatamente que todos los momentos de orden impar son nulos debido a la invarianza de  $\overrightarrow{c_i}$  frente a la reversibilidad del espacio. El momento de orden 2 es isótropo por la propiedad 3. Cuando el conjunto de velocidades  $\overrightarrow{c_i}$  no contiene más que  $b_m$  velocidades no nulas de módulo  $c$  (cualquiera que sea el número  $b_r$  de velocidades nulas), se tiene que  $\sum_i \overrightarrow{c_{i\alpha}} \overrightarrow{c_{i\alpha}} = b_m c^2$ , lo que implica que

$$\sum_i \overrightarrow{c_{i\alpha}} \overrightarrow{c_{i\beta}} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}.$$

No ha sido posible obtener hasta nuestros días una expresión simple para el momento de velocidades de orden 4 a partir de las condiciones impuestas a  $\overrightarrow{c_i}$ .

## 2.5 Reglas de evolución de un AGR

El estado microscópico es el fundamental en el estudio de un sistema. En un gas reticular, a cada nodo de la retícula le atribuimos una palabra binaria de  $b$  bits en el que cada bit se corresponde con la presencia (1) o ausencia (0) de una partícula correspondiente a la ocupación de los canales de velocidad, y se toma

$|\vec{c}| = 1$  por simplicidad. El estado de cada nodo  $\vec{r} \in \mathcal{L}$  se representa mediante un conjunto  $s(\vec{r}) = \{s_i(\vec{r}); i = 0, \dots, b-1\}$  que puede descomponerse en varias poblaciones; así por ejemplo, pueden existir dos especies diferentes (en color, composición química, etc..) de partículas,  $x$  e  $y$ , y entonces habría que definir para cada nodo los conjuntos siguientes:

$$x(\vec{r}) = \{x_i(\vec{r}); i = 0, \dots, b-1\} \text{ e } y(\vec{r}) = \{y_i(\vec{r}); i = 0, \dots, b-1\}$$

**La ocupación en masa**  $n(\vec{r})$

$$n(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{l} (n_i(\vec{r}) = x_i(\vec{r})) \vee (n_i(\vec{r}) = y_i(\vec{r})); \\ i = 0, \dots, b-1 \end{array} \right\}$$

es la realización de cada estado y por lo tanto describe la ocupación de cada lugar por una partícula, independientemente de la especie que sea.

**La evolución temporal** consiste en una serie de secuencias en 2 etapas y cada secuencia forma un paso de tiempo que se considera unitario y se conoce por **tiempo característico**.

(i) La primera etapa es la de **propagación** en la que se realiza una aplicación  $P$  que satisface la ley

$$n_i(\vec{r} + \tau \vec{c}_i, t+1) = n_i(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

(ii) La segunda etapa es la de **colisión** o distribución en la que un nodo puede cambiar su estado siguiendo algunas leyes como la conservación de la masa y del impulso; por lo tanto hay una redistribución de las ocupaciones de los canales. La etapa de colisión se considera instantánea, sin paso de tiempo, luego las dos etapas se consideran realizadas en un solo paso de tiempo. Todas las transiciones posibles  $s \rightarrow s'$  tienen una probabilidad  $A(s \rightarrow s') \geq 0$ ,

independientemente del tiempo y de la posición, y están además normalizadas a 1:

$$\forall s, \quad \sum_{s'} A(s \rightarrow s') = 1 \quad (2.5)$$

$A$  puede considerarse como una matriz  $2^b \times 2^b$  en la que todos los elementos no nulos representan las transiciones posibles de un estado  $s$  a otro estado  $s'$  y que debe cumplir las siguientes condiciones:

• **Leyes de conservación:** Las únicas cantidades conservadas en las colisiones son el número total de partículas de cada especie y el momento total o impulso. Si  $n_i$  es el número de partículas en el estado de entrada y  $n'_i$  el número de partículas en el estado de salida, se cumple que:

$$\sum_i n_i = \sum_i n'_i \quad (2.6)$$

$$\sum_i n_i \vec{c}_i = \sum_i n'_i \vec{c}_i \quad (2.7)$$

En otras palabras, si para cualquier conjunto de números  $\{a_i\}$  se cumple que

$$\forall s, \forall s', \quad |A(s \rightarrow s')| \neq 0, \quad \sum_{i=0}^{b-1} s_i a_i = \sum_{i=0}^{b-1} s'_i a_i \quad (2.8)$$

o que

$$\forall s, \forall s', \quad \sum_i (s'_i - s_i) A(s \rightarrow s') a_i = 0 \quad (2.9)$$

ello implica que los  $\{a_i\}$  son combinaciones lineales de 1 para los valores de  $i$  correspondientes a las partículas  $X$ , de 1 para los valores de  $i$  correspondientes a las partículas  $Y$ , y de todas las componentes de la velocidad  $\vec{c}_i$  correspondiente.

- Las reglas de la colisión son invariantes para toda isometría de la retícula que preserve el conjunto de velocidades, lo cual se expresa como

$$\forall s, \forall s', \forall \mathbf{G} \in \mathcal{G}, \quad A(\mathbf{G}(s) \rightarrow \mathbf{G}(s')) = A(s \rightarrow s') \quad (2.10)$$

- Las probabilidades de transición verifican el **balance semidetallado** que se escribe como

$$\forall s', \quad \sum_s A(s \rightarrow s') = 1, \quad (2.11)$$

y nos expresa que la probabilidad de cada configuración es conservada por las colisiones, es decir, que el desdoblamiento de una configuración debido a las colisiones ( $\sum_s A(s \rightarrow s') = 1$ ) es exactamente compensado por el poblamiento debido a las transiciones ( $\sum_{s'} A(s' \rightarrow s) = 1$ ) que provienen de todas las otras configuraciones. La condición de balance semidetallado es una forma débil y menos restrictiva del "balance detallado" —que se expresa como  $A(s \rightarrow s') = A(s' \rightarrow s)$ — y que corresponde a una reversibilidad estadísticamente rigurosa de las colisiones. Dicho en otras palabras, el balance detallado estipula que las colisiones que modifican una configuración de estado  $s$  en otra de estado  $s'$ , tienen lugar con la misma probabilidad que las colisiones que producen la transición inversa. Es un hecho importante que el sistema físico cuyo modelo se está analizando pueda alcanzar un equilibrio y que una vez que lo alcance, lo conserve. La condición de balance detallado es *suficiente* para asegurar la existencia de un estado de equilibrio.

## 2.6 Dinámica Microscópica

El comportamiento macroscópico de los modelos de gases reticulares se analiza describiendo primero la evolución temporal microscópica mediante ecuaciones

microdinámicas en forma matemática. Estas ecuaciones vienen a jugar el papel de las ecuaciones de Hamilton en la dinámica tradicional de medios continuos, si bien las formas respectivas de las ecuaciones son evidentemente equivalentes solamente en estructura. A partir de las ecuaciones microdinámicas puede deducirse una ecuación llamada de Liouville que expresa la conservación de la probabilidad de todas las partículas. Finalmente, se introducen cantidades medias sobre las probabilidades de las diferentes configuraciones, las cuales se corresponden con observables físicas habituales; a continuación se establece una ecuación de Boltzmann discreta que describe la evolución microscópica de las cantidades medias bajo la hipótesis de **caos microscópico** [55]. A partir de la ecuación de Boltzmann se pueden hallar las ecuaciones para la evolución de las cantidades hidrodinámicas usando un desarrollo llamado de Chapman-Enskog.

### 2.6.1 Ecuaciones Booleanas

Las variables  $x_i$  e  $y_i$  que describen las poblaciones de un nodo de la retícula son cantidades Booleanas y el estado post-colisión de un nodo depende solamente de la configuración pre-colisión de las partículas en ese nodo y no de la posición del nodo. Por ello, las reglas de evolución de la retícula pueden escribirse de manera *exacta* mediante operaciones lógicas entre las variables  $x_i$  e  $y_i$ . Estas reglas de evolución son las mismas para cada nodo y son válidas cualquiera que sea el tamaño de la retícula porque las interacciones son puramente locales<sup>2</sup>.

Por claridad y a título de ejemplo, escribiremos explícitamente las ecuaciones microscópicas para gases reticulares de una especie ( $n_i$ ) para evitar la

---

<sup>2</sup>Si bien las ecuaciones de Newton son también exactas, son ecuaciones diferenciales cuya solución a menudo solamente puede obtenerse de manera aproximada, mientras que las ecuaciones microdinámicas de los gases reticulares son ecuaciones exactas que pueden ser resueltas sin ninguna aproximación por tratarse de ecuaciones en diferencias finitas.

complejidad inherente al gran número de configuraciones de precolisión posibles cuando existen dos especies. Así, para el modelo HPP se pueden obtener de la manera siguiente: la población en una dirección queda solamente modificada si dos (y sólo dos) partículas se presentan en un nodo viniendo de direcciones opuestas; una dirección se queda vacía si es una de las que están ocupadas en el estado pre-colisión y se llena si estaba vacía. Esto se puede escribir de forma Booleana como

$$n_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = n_i \wedge \overline{(n_i \wedge n_{i+2} \wedge \overline{n_{i+1}} \wedge \overline{n_{i+3}})} \vee (n_{i+1} \wedge n_{i+3} \wedge \overline{n_i} \wedge \overline{n_{i+2}}), \quad (2.12)$$

donde el miembro de la derecha está evaluado en  $\vec{r}$  y en el tiempo  $t$ . Los signos  $\vee$ ,  $\wedge$  y  $\overline{\phantom{x}}$  son respectivamente, el O, Y y la negación lógica. Las operaciones sobre los índices se realizan módulo  $b_m$  (que vale 4 en el caso del modelo HPP). Esta ecuación Booleana puede reescribirse más simplemente en términos de operaciones aritméticas de la forma

$$\begin{aligned} n_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) &= n_i - n_i n_{i+2} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+3}) + \\ &\quad + n_{i+1} n_{i+3} (1 - n_i) (1 - n_{i+2}) \\ &= n_i + \Delta_i(n_i) \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde  $\Delta_i(n_i)$  puede tomar los valores 0 y  $\pm 1$  y representa el efecto de las colisiones sobre la dinámica [31].

Para escribir las ecuaciones microdinámicas en el caso, más general, de modelos con dos especies se necesitan todas las configuraciones  $\sigma$

$$\sigma = \{x_{\sigma,i}, y_{\sigma,i}; i = 0, \dots, b - 1\} \quad (2.14)$$

y  $\sigma'$  realizables en ese nodo; las ecuaciones de evolución se obtienen ahora

considerando las posibles transiciones entre cada una de las configuraciones  $\sigma$  y  $\sigma'$  extrayendo de la configuración post-colisión  $\sigma'$  el nuevo estado  $s_i$ . Si tuviéramos un sistema determinista, el número de reglas posibles de colisión que se pueden construir es enorme, exactamente  $(2^b)^{2^b}$ , pero las limitaciones físicas del sistema no lo permiten. La mayoría de los modelos son no deterministas, pudiendo asociar en cada nodo y para cada paso de tiempo un conjunto de  $2^b \times 2^b$  variables booleanas  $\xi_{\sigma\sigma'}(\vec{r}, t)$  que seleccionan alguna realización particular de las reglas de transición probabilistas entre una configuración pre-colisión  $\sigma$  y una configuración post-colisión  $\sigma'$ . La media espacio-temporal de  $\xi_{\sigma\sigma'}$  tiene la forma

$$\forall \sigma, \forall \sigma', \quad \langle \xi_{\sigma\sigma'} \rangle_{\vec{r}, t} = A(\sigma \rightarrow \sigma'), \quad (2.15)$$

donde  $A(\sigma \rightarrow \sigma')$  es la matriz de probabilidades de transición introducida en el apartado anterior.

Cada realización de  $\xi_{\sigma\sigma'}$  se corresponde con escoger un único estado  $\sigma'$  para cada estado  $\sigma$ . Por lo tanto existe solamente un valor de  $\xi_{\sigma\sigma'}$  no nulo para cada  $\sigma$ , lo que se puede escribir como

$$\forall \sigma, \quad \sum_{\sigma'} \xi_{\sigma\sigma'} = 1 \quad (2.16)$$

ya que todas las  $\xi_{\sigma\sigma'}$  son booleanas. Como generalización de los productos booleanos que representan el parámetro de colisión descrito anteriormente, se puede definir un operador lógico  $\delta(s, \sigma)$  para comprobar la igualdad de los vectores  $s_j$  y  $\sigma_j$  y que tiene la forma

$$\delta(s, \sigma) = \prod_{j=0}^{b-1} s_j^{\sigma_j} (1 - s_j)^{(1-\sigma_j)}. \quad (2.17)$$

Esta expresión vale 1 solamente cuando todos los  $\sigma_j$  son iguales a todos los  $s_j$

y 0 en los demás casos por tratarse de productos booleanos. Se puede decir, por lo tanto, que la ocupación de un canal  $i$  antes de la colisión es la suma sobre  $\sigma$  de la ocupación correspondiente a un estado que es compatible con el de entrada  $\sigma_i \delta(s, \sigma)$ , susceptible de producir  $s_i$  :

$$\sum_{\sigma} \sigma_i \prod_{j=0}^{b-1} s_j^{\sigma_j} (1 - s_j)^{(1-\sigma_j)} = s_i. \quad (2.18)$$

Las ecuaciones microdinámicas pueden escribirse como una propagación lineal en la forma

$$s_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_{\sigma, \sigma'} \sigma'_i \xi_{\sigma, \sigma'} \prod_{j=0}^{b-1} s_j^{\sigma_j} (1 - s_j)^{(1-\sigma_j)}, \quad (2.19)$$

o, lo que es lo mismo,

$$s_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = s_i + \Delta_i(s) \quad (2.20)$$

siendo

$$\Delta_i(s) = \sum_{\sigma, \sigma'} (\sigma'_i - \sigma_i) \xi_{\sigma, \sigma'} \prod_{j=0}^{b-1} s_j^{\sigma_j} (1 - s_j)^{(1-\sigma_j)} \quad (2.21)$$

Si separamos las dos especies  $x_j$  e  $y_j$  que corresponden a la dirección  $j$ , y viendo que

$$(1 - x_j)(1 - y_j) = (1 - (x_j \vee y_j)) \quad (2.22)$$

por ser  $x_j$  e  $y_j$  variables booleanas mutuamente excluyentes ( $x_j \vee y_j \equiv 0$ ), el término de colisión puede reescribirse usando las poblaciones de cada especie:

$$\Delta_i(s) = \sum_{\sigma, \sigma'} (\sigma'_i - \sigma_i) \xi_{\sigma, \sigma'} \prod_{j=0}^{b-1} x_j^{x_{\sigma, j}} y_j^{y_{\sigma, j}} (1 - (x_j \vee y_j))^{(1 - (x_{\sigma, j} \vee y_{\sigma, j}))} \quad (2.23)$$

$$= \sum_{\sigma, \sigma'} (\sigma'_i - \sigma_i) \xi_{\sigma, \sigma'} \prod_{j=0}^{b-1} x_j^{x_{\sigma, j}} y_j^{y_{\sigma, j}} (1 - n_j)^{(1 - n_{\sigma, j})}. \quad (2.24)$$

Las propiedades de conservación del número de partículas de cada especie y del momento total a lo largo de las colisiones, se pueden escribir usando términos de ocupación microscópicos

$$\sum_i x_i(\vec{r}' + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i x_i(\vec{r}', t) \quad (2.25)$$

$$\sum_i y_i(\vec{r}' + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i y_i(\vec{r}', t) \quad (2.26)$$

$$\sum_i n_i(\vec{r}' + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i n_i(\vec{r}', t) \quad (2.27)$$

$$\sum_i \vec{c}_i n_i(\vec{r}' + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i \vec{c}_i n_i(\vec{r}', t), \quad (2.28)$$

lo que implica para las funciones de colisión  $\Delta_i$  las relaciones

$$\sum_i \Delta_i(x) = 0 = \sum_i \Delta_i(y) \quad (2.29)$$

$$\sum_i \Delta_i(n) = 0 \quad (2.30)$$

$$\sum_i \vec{c}_i \Delta_i(n) = 0, \quad (2.31)$$

para todos los valores de  $x, y, n$  del conjunto de palabras de  $b$  bits.

## 2.6.2 Ecuación de Liouville

Habiendo descrito la dinámica microscópica del sistema, se puede definir su **espacio de fases**  $\Gamma$ . El **espacio de fases**  $\Gamma$  del sistema, en el caso de los gases reticulares, es el conjunto de todas las configuraciones posibles para todos los nodos. Un "punto" de este espacio de fases se corresponde por lo tanto con una configuración particular  $s$ . del conjunto de la retícula  $\mathcal{L}$  definida por

$$s.(\vec{r}) = \{s_i(\vec{r}); i = 0, \dots, b - 1\}, \quad \forall \vec{r} \in \mathcal{L} \quad (2.32)$$

El **operador de evolución**  $\mathcal{E}$  de la retícula se define componiendo los operadores de colisión  $\mathcal{C}$  y de propagación o desplazamiento  $\mathcal{D}$ :  $\mathcal{E} = \mathcal{D} \circ \mathcal{C}$ , siendo

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : s_i(\vec{r}) &\Leftarrow s_i(\vec{r}) + \Delta_i(s_i(\vec{r})) \\ \mathcal{D} : s_i(\vec{r}) &\Leftarrow s_i(\vec{r} - \vec{c}_i) \end{aligned} \quad (2.33)$$

lo que permite describir la evolución global de una retícula como

$$s.(t + 1) = \mathcal{E}s.(t) \quad (2.34)$$

Se puede considerar ahora la evolución de un conjunto de configuraciones  $s$ . teniendo cada una una probabilidad  $P(s., t) \geq 0$ , por lo que

$$\forall t, \quad \sum_{s. \in \Gamma} P(s., t) = 1. \quad (2.35)$$

La **ecuación de Liouville** expresa la conservación de la probabilidad de cada configuración mediante las reglas de evolución del sistema, lo que se puede escribir como

$$P(\mathcal{E}s., t + 1) = P(s., t). \quad (2.36)$$

Esta es la ecuación equivalente para los gases reticulares, a la ecuación de Liouville habitual de la Mecánica Estadística [43], [51].

Si las reglas de colisión son deterministas y biyectivas, el operador  $\mathcal{C}$  es inversible, con lo que la ecuación de Liouville puede escribirse de la forma

$$P(\mathcal{D}s., t + 1) = P(\mathcal{C}^{-1}s., t). \quad (2.37)$$

En el caso general de que las reglas de colisión sean probabilistas, la evolución global de las configuraciones se convierte en un proceso de Markov ya que las  $\xi_{ss'}$  se escogen de manera independiente en cada paso de tiempo en cada nodo. Así pues, la ecuación de conservación se convierte en la ecuación de **Chapman-Kolmogorov**

$$P(\mathcal{D}s., t + 1) = \sum_{s. \in \Gamma} \prod_{\vec{r} \in \mathcal{L}} A(s(\vec{r}) \rightarrow s'(\vec{r})) P(s., t), \quad (2.38)$$

la cual expresa que la probabilidad de una configuración  $s'$  en el tiempo  $t+1$  es igual a la suma de probabilidades de todas las configuraciones  $s.$  que puedan dar lugar a  $s'$ , apareciendo multiplicada cada probabilidad por la probabilidad de transición de  $s.$  a  $s'$ . Esta última probabilidad es el producto de todos los  $A(s \rightarrow s')$  ya que los  $\xi_{ss'}$  son independientes.

### 2.6.3 Las cantidades medias

Habiendo definido la distribución de probabilidades  $P(s., t)$  en el espacio de configuraciones  $\Gamma$ , se define el valor medio  $Q$  de un observable físico  $q$  dependiente de la configuración  $s.$ , realizando una media de conjunto sobre el con-

junto de las configuraciones, esto es

$$Q(\vec{r}, t) \equiv \langle q(\vec{r}, t) \rangle = \sum_{s \in \Gamma} q(s, (\vec{r})) P(s, t). \quad (2.39)$$

Las cantidades medias de interés se corresponden con medias de variables de estado microscópicas, es decir, las tasas de ocupación global media, las poblaciones medias de cada especie y la masa media, cuyas formas respectivas son

$$\begin{aligned} S_i(\vec{r}, t) &= \langle s_i(\vec{r}, t) \rangle \\ X_i(\vec{r}, t) &= \langle x_i(\vec{r}, t) \rangle \\ Y_i(\vec{r}, t) &= \langle y_i(\vec{r}, t) \rangle \\ N_i(\vec{r}, t) &= \langle n_i(\vec{r}, t) \rangle = X_i(\vec{r}, t) + Y_i(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (2.40)$$

A partir de estas cantidades medias, se definen las cantidades medias conservadas localmente por la dinámica, es decir, **la densidad**  $\rho(\vec{r}, t)$ , la corriente de masa o **cantidad de movimiento**  $\mathbf{j}(\vec{r}, t)$  y **la concentración local de la especie X**,  $\theta(\vec{r}, t)$  mediante las fórmulas siguientes:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i N_i(\vec{r}, t) \quad (2.41)$$

$$\mathbf{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{u}(\vec{r}, t) = \sum_i \vec{c}_i N_i(\vec{r}, t) \quad (2.42)$$

$$\rho(\vec{r}, t) \theta(\vec{r}, t) = \sum_i X_i(\vec{r}, t), \quad (2.43)$$

siendo la densidad media por unión  $d = \rho/b$ .

Tomando la media de conjunto de las relaciones de conservación microscópicas,

se obtienen las relaciones de conservación que satisfacen las cantidades medias

$$\sum_i N_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i N_i(\vec{r}, t) \quad (2.44)$$

$$\sum_i \vec{c}_i N_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i \vec{c}_i N_i(\vec{r}, t) \quad (2.45)$$

$$\sum_i X_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i X_i(\vec{r}, t) \quad (2.46)$$

Luego  $\rho$ ,  $\rho \vec{u}$  y  $\rho \theta$  son cantidades bien conservadas por el operador de evolución  $\mathcal{E}$ .

#### 2.6.4 Soluciones en el equilibrio

En 1973, Hardy *et al.* demostraron que el modelo HPP tiene soluciones, en el equilibrio, estadísticamente simples, a las que llamaron "estados invariantes", en los que las variables lógicas en todos los canales son independientes. Estas soluciones en el equilibrio son el equivalente en un gas reticular a los estados de Maxwell en mecánica estadística clásica y son por lo tanto cruciales para la obtención de las ecuaciones de la hidrodinámica. Veamos algunos resultados similares para modelos no deterministas.

Se intenta obtener soluciones en el equilibrio, es decir, soluciones estacionarias para una retícula finita con condiciones de contorno periódicas y colisiones puramente locales. Las propiedades de la retícula son invariantes por traslación, por lo que la distribución debería ser la misma para cada nodo. Por lo tanto estamos buscando soluciones de la forma

$$P(s) = \prod_{\vec{r}} p(s(\vec{r})), \quad (2.47)$$

donde  $p(s)$  es la probabilidad de un estado dado y es independiente del nodo escogido. La maximización de la entropía sugiere que  $p(s)$  debería estar completamente factorizada sobre todos los canales, es decir,

$$p(s) = \prod_i N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)}. \quad (2.48)$$

siendo  $N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)}$  la probabilidad de una variable lógica con media  $N_i$ .

Para encontrar las soluciones que se buscan, se sustituye (2.48) en (2.47) y luego en la ecuación de Liouville, y se obtiene

$$\forall s', \quad \prod_i N_i^{s'_i} (1 - N_i)^{(1-s'_i)} = \sum_s A(s \rightarrow s') \prod_i N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)} \quad (2.49)$$

siendo  $N_i$  la población media del canal  $i$  independiente del nodo y del tiempo.

La ecuación anterior es un grupo de  $2^b$  ecuaciones (el número de estados diferentes) para los  $b$  valores desconocidos; el hecho de que posea soluciones no es trivial. Así se tiene el siguiente lema.

**Lema 1.** Los siguientes asertos son equivalentes:

- Los  $N_i$  son soluciones de la ecuación (2.49).
- Los  $N_i$  son una solución de un conjunto de  $b$  ecuaciones de la forma

$$\forall i, \quad \sum_{ss'} (s'_i - s_i) A(s \rightarrow s') \prod_j N_j^{s_j} (1 - N_j)^{(1-s_j)} = 0. \quad (2.50)$$

- Los  $N_i$  vienen dados por la distribución de Fermi-Dirac

$$N_i = \frac{1}{1 + \exp(h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i)}, \quad (2.51)$$

donde  $h$  es un número real arbitrario y  $\vec{q}$  un vector arbitrario de dimensión  $D$ .

Las demostraciones de la equivalencia vienen dadas en [24], y para ellas

se usan las condiciones de balance semidetallado y la ausencia de invariantes espurias. La consecuencia más importante de este lema es el **Teorema de Universalidad** que dice que los modelos de gas reticular no deterministas que satisfagan el balance semidetallado y no tengan invariantes espurias admiten soluciones en el equilibrio universales, completamente factorizadas sobre todos los nodos y canales, con poblaciones medias dadas por la distribución de Fermi-Dirac, que dependen solamente de la densidad  $\rho$  y del impulso  $\vec{j} = \rho \vec{u}$ , y por lo tanto independientes de las probabilidades de transición  $A(s \rightarrow s')$ .

La demostración parte de la observación de que los multiplicadores de Lagrange  $h$  y  $\vec{q}$  de la distribución de Fermi-Dirac pueden ser calculados en función de la densidad y del impulso a través de las relaciones

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i N_i = \sum_i \frac{1}{1 + \exp(h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i)}, \\ \rho \vec{u} &= \sum_i N_i \vec{c}_i = \sum_i \vec{c}_i \frac{1}{1 + \exp(h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i)}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Se conocen soluciones explícitas para el modelo HPP y solamente en casos especiales para el modelo FHP. No es sorprendente que los modelos con un principio de exclusión tengan una distribución de Fermi-Dirac en el equilibrio ya que las soluciones factorizadas en el equilibrio tienen sentido en una retícula infinita. No se ha demostrado hasta el momento que las únicas soluciones en el equilibrio que son relevantes en el límite de retículas infinitas tengan la forma anterior, es decir, completamente factorizadas (lo que implica una distribución de Fermi-Dirac). Sin embargo, hay evidencia de que para los modelos que han sido simulados, la distribución de Fermi-Dirac es la única relevante.

### 2.6.5 Ecuación de Boltzmann sobre la reticula

En teoría cinética clásica, un gas monoatómico ideal queda completamente descrito mediante la función de distribución reducida  $f(\vec{r}, \vec{c}, t)$  definida en

el sentido de que  $f(\vec{r}, \vec{c}, t)d\vec{r}d\vec{c}$  representa el número medio de partículas en el elemento de volumen  $d\vec{r}d\vec{c}$  del espacio de fases de una sola partícula. Dentro del marco de los AGR,  $f(\vec{r}, \vec{c}, t)$  está definida por la relación

$$f(\vec{r}, \vec{c}; t) = \langle n(\vec{r}, \vec{c}; t) \rangle_{NE} \quad (2.53)$$

Es por lo tanto el valor medio de la variable Booleana  $n(\vec{r}, \vec{c}, t)$  asociada a la ocupación del canal de velocidad  $\vec{c}$ , perteneciente al nodo  $\vec{r}$ , en el tiempo  $t$ , habiendo tomado la media  $\langle \rangle$  para un conjunto que no estaba en el equilibrio ( $NE$ ).

Las ecuaciones microdinámicas introducidas anteriormente son ecuaciones exactas y describen la evolución de las variables microscópicas  $s_i$ . Tomando la media de conjunto de la ecuación Booleana se obtiene la ecuación de evolución de las ocupaciones microscópicas medias  $S_i$

$$S_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = S_i + \langle \Delta_i(s) \rangle \quad (2.54)$$

$$\langle \Delta_i(s) \rangle = \sum_{\sigma, \sigma'} (\sigma'_i - \sigma_i) A(\sigma - \sigma') \left\langle \prod_j x_j^{x_{\sigma,j}} y_j^{y_{\sigma,j}} (1 - n_j)^{(1 - n_{\rho,j})} \right\rangle. \quad (2.55)$$

Al igual que en Mecánica Estadística habitual, la ecuación de la probabilidad de la presencia de una partícula no es una ecuación *cerrada* porque en ella intervienen funciones de probabilidad de ocupación de más de una partícula [29]. La ecuación que determina la evolución temporal de la función de distribución  $f(\vec{r}, \vec{c}, t)$  se obtiene fácilmente tomando la media de no equilibrio de la ecuación microdinámica

$$n(\vec{r} + \vec{c}, \vec{c}; t + 1) - n(\vec{r}, \vec{c}; t) = I \left( n(\vec{c}) \right). \quad (2.56)$$

El resultado de esta operación se escribe como

$$f(\vec{r} + \vec{c}, \vec{c}; t+1) - f(\vec{r}, \vec{c}; t) = \left\langle I \left( n(\vec{c}) \right) \right\rangle. \quad (2.57)$$

La media del término de colisión introduce en esta ecuación funciones de distribución reducidas de orden superior a  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$ . Estas funciones de distribución de 2, 3, ...,  $b$  puntos son el resultado de la media de los términos no lineales contenidos en  $I \left( n(\vec{c}) \right)$ :

$$\begin{aligned} f_1(\vec{r}_0 \vec{r}_1, \vec{c}_0 \vec{c}_1; t) &= \langle n(\vec{r}_0, \vec{c}_0; t) n(\vec{r}_1, \vec{c}_1; t) \rangle \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$f_{b-1}(\vec{r}_0 \dots \vec{r}_{b-1}, \vec{c}_0 \dots \vec{c}_{b-1}; t) = \langle n(\vec{r}_0, \vec{c}_0; t) \dots n(\vec{r}_{b-1}, \vec{c}_{b-1}; t) \rangle$$

La búsqueda de una ecuación cinética que tenga como única incógnita la función  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$  es un problema clave en mecánica estadística cuando no hay equilibrio; desde el punto de vista de la teoría cinética, es exacta solamente aquella descripción que tenga en cuenta el estado de cada canal de la retícula. El estudio de un fenómeno basado en una solución exacta del problema de los  $N$  cuerpos no se puede afrontar, dado que dicha solución es inaccesible; además, una solución microscópica exacta llevaría consigo muchos detalles inútiles. Partiendo de una descripción que contiene un máximo de información, se pueden construir diferentes niveles de descripción; para ello se introducen desde el principio ciertas aproximaciones para eliminar detalles *a priori* superfluos.

Así, la función de distribución  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$ , que está definida como una integración sobre la función de distribución  $f_{N_{b-1}}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N_{b-1}}; t)$  total, dota a

un sistema de una descripción menos detallada que la total. De la misma forma, se puede decir que la descripción de un fluido en términos de cantidades hidrodinámicas ofrece menos información a través de la función  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$ . Esta sucesión de aproximaciones culmina cuando se llega a una descripción solamente con términos de variables termodinámicas. Para tratar problemas que no están en equilibrio, hay que buscar ecuaciones cuyas variables relativas tengan que ser satisfechas con un cierto grado de descripción. Así, se puede decir que la ecuación de Boltzmann es menos exacta que la ecuación de Liouville o que las ecuaciones de la hidrodinámica son menos exactas que la ecuación de Boltzmann.

La reducción de la información que lleva consigo una descripción en términos de  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$  se refleja en la imposibilidad de poder definir de manera única  $f_{N_b-1}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N_b-1}; t)$  a partir de  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$ . De manera similar pero a un nivel de descripción menor, esta indeterminación se traduce en la existencia de varias funciones  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$  que definen un estado termodinámico idéntico.

En estos casos se adopta el siguiente procedimiento general. Supongamos que se realiza una descripción en términos de una función  $P$  y que se realiza otra descripción menos detallada mediante una función  $F$ ; vamos a suponer que el conocimiento de  $F$  nos proporciona toda la información necesaria y partiendo de esta suposición se trata de construir una función  $P$  única que sea compatible con la función  $F$  prescrita (en general  $P$  será una función de  $F$ ) y de esta manera eliminamos al mismo tiempo toda una clase de funciones  $P$ . Gracias a este procedimiento es posible determinar el cambio temporal de  $P$  a partir del cambio temporal de  $F$ , es decir, una ecuación de evolución para  $P$  a partir de una ecuación de evolución para  $F$ .

Un ejemplo de lo anteriormente explicado es el problema ligado a la ecuación cerrada de probabilidad de presencia de una partícula. La hipótesis que se hace

normalmente para obtener una ecuación para  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$  es la hipótesis de *caos molecular* desarrollada por Boltzmann. Para realizar esta hipótesis se supone que los estados de las partículas que entran en colisión están estadísticamente incorrelados; físicamente esta hipótesis tiene sentido cuando se aplica a un gas diluido porque en ese caso las partículas que están suficientemente separadas no interaccionan y su comportamiento es totalmente independiente del comportamiento de otras partículas. Esta independencia estadística no se verifica sin embargo para partículas que hayan colisionado porque la interacción a que han estado sometidas ha creado una correlación entre ellas. La hipótesis de caos molecular se inscribe perfectamente en el cuadro del procedimiento general cuando al adoptarlo suponemos que toda la información necesaria está contenida en  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$ ; lo que dice exactamente es que la función de distribución instantánea  $f_{r+s}$  de un conjunto de  $s + r$  partículas, es el producto de las probabilidades individuales  $f_r f_s$  si no existe ninguna partícula del grupo  $r$  que ejerza una fuerza sobre una partícula del grupo  $s$ . Como consecuencia de ello, se puede realizar una factorización y expresar las funciones de distribución  $f_1, \dots, f_{b-1}$  como un producto de funciones  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$

$$\begin{aligned}
 f_1(\vec{r}_0 \vec{r}_1, \vec{c}_0 \vec{c}_1; t) &= f(\vec{r}_0, \vec{c}_0; t) f(\vec{r}_1, \vec{c}_1; t) \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 &\cdot
 \end{aligned}
 \tag{2.59}$$

$$f_{b-1}(\vec{r}_0 \dots \vec{r}_{b-1}, \vec{c}_0 \dots \vec{c}_{b-1}; t) = f(\vec{r}_0, \vec{c}_0; t) \dots f(\vec{r}_{b-1}, \vec{c}_{b-1}; t)$$

Teniendo en cuenta las relaciones funcionales de (2.59) en el término de colisión de (2.57), podemos reemplazar  $\langle I(n(\vec{c})) \rangle$  por  $I(f(\vec{c}))$ . De este procedimiento resulta una ecuación cinética única para  $f(\vec{r}, \vec{c}; t)$

$$f(\vec{r}' + \vec{c}', \vec{c}'; t + 1) - f(\vec{r}', \vec{c}'; t) = I(f(\vec{c}')). \quad (2.60)$$

Esta ecuación se basa en la **hipótesis de Boltzmann**, por lo que por analogía con la teoría cinética continua se le llama **ecuación reticular de Boltzmann**. Examinando el término de colisión  $I(f(\vec{c}'))$  y si por claridad se utilizan las letras  $i, j, \dots$  para representar las diferentes velocidades  $\vec{c}, \vec{c}', \dots$ , se puede escribir sin restricciones para todo modelo de gas reticular con interacciones locales que

$$I_i(f) = \sum_{ss'} (s'_i - s_i) A_{ss'} \prod_{k=0}^{b-1} f_k(\vec{r}'; t)^{s_k} (1 - f_k(\vec{r}'; t))^{(1-s_k)}. \quad (2.61)$$

De acuerdo con lo anterior las ecuaciones (2.54) y (2.55) quedarán de la forma

$$S_i(\vec{r}' + \vec{c}', t + 1) = S_i + \Delta_i^B(S) \quad (2.62)$$

$$\Delta_i^B(S) = \sum_{\sigma, \sigma'} (s'_i - s_i) A(s \rightarrow s') \prod_j X_j^{x_j} Y_j^{y_j} (1 - N_j)^{(1-n_j)}. \quad (2.63)$$

La ecuación de Boltzmann origina así un sistema de ecuaciones en diferencias finitas que puede ser resuelto exactamente mediante simulación numérica [55]. Parece evidente la conveniencia de utilizar esta ecuación de evolución en lugar de las ecuaciones Booleanas microscópicas, es decir, trabajar con poblaciones medias  $S_i$  en vez de con estados microscópicos  $s_i$ .

Esta aproximación tiene la ventaja de hacer desaparecer el ruido que aparece cuando se realizan las simulaciones Booleanas usando el método de Monte-

Carlo. La precisión del cálculo con esta metodología va a depender esencialmente de dos factores: el número de partículas utilizadas, que será siempre finito, lo que impondrá realizar correcciones si los resultados se van a comparar con valores experimentales, y el número de configuraciones generadas, ya que pueden aparecer fluctuaciones alrededor del valor medio que pueden disminuir muy lentamente; de hecho, la amplitud de estas fluctuaciones es un indicador de la precisión con la que medimos la cantidad estudiada [49]. Por otro lado, como los cálculos en la ecuación de Boltzmann se realizan sobre medias en el espacio de fases, no se tendrá que realizar ésta para que aparezcan las cantidades hidrodinámicas.

En contrapartida, la ecuación reticular de Boltzmann necesita efectuar las simulaciones utilizando cantidades *reales*  $S_i$  en vez de variables Booleanas  $s_i$ , lo que implica una ocupación de memoria más grande para realizar la memorización del estado de la retícula y una complejidad mayor en las operaciones de colisión. Los cálculos dejan de ser igualmente perfectos ya que aparecen errores de redondeo en la evaluación del operador de colisión. Desde un punto de vista fundamental, está claro que la ecuación de Boltzmann representa una simplificación de la dinámica de los gases reticulares ya que no tiene en cuenta las correlaciones entre partículas; si bien es verdad que en muchas simulaciones no es necesario conocer las fluctuaciones, sin embargo estas correlaciones son el origen de una gran riqueza de comportamientos físicos interesantes, como por ejemplo el decrecimiento no exponencial de las funciones de autocorrelación de los flujos de las cantidades conservadas.

Sin embargo, la ecuación reticular de Boltzmann puede ser considerada como una alternativa a la utilización de ecuaciones microscópicas. El llamado método de Boltzmann discretizado sobre la retícula parte de la ecuación reticular de Boltzmann y representa un esquema particular en diferencias finitas

que permite resolver las ecuaciones de Navier-Stokes bajo las condiciones bien establecidas de la teoría general. Proporciona un punto de partida conveniente para la descripción del comportamiento macroscópico del fluido y presenta la ventaja de ser numéricamente estable gracias a la existencia del teorema  $\mathcal{H}$ . También permite obtener una expresión explícita de los coeficientes de transporte a partir de las reglas de colisión.

### Teorema $\mathcal{H}$

En este teorema,  $\mathcal{H}$  quiere decir entropía en el sentido de la teoría de la información; esta magnitud es crucial porque representa la esencia de la evolución de los sistemas hacia el equilibrio o hacia cierta estabilidad [8]. Es lo que en Física hace que los sistemas disipativos vuelvan hacia el equilibrio. El problema con el que se encontró Boltzmann es que su ecuación es irreversible, ya que en su ecuación tenemos un sistema fuera del equilibrio y lo dejamos evolucionar hacia la distribución de equilibrio; si se invierte el tiempo, la ecuación no es reversible. Su hipótesis hace que las partículas pierdan su memoria, lo que hace que no puedan volver por el mismo camino.

La entropía de un sistema en términos de la teoría de la información, según la definición de Boltzmann, donde  $P(s)$  representa la probabilidad de un estado de entrada  $s$ , viene dada por

$$\mathcal{H}(t) = - \sum_s P(s) \log P(s)$$

Dentro del cuadro de aproximación de Boltzmann y siempre que las reglas de colisión satisfagan la condición de balance semidetallado, Hénon—en el apéndice F de [23]—demostró un teorema  $\mathcal{H}$  que implica que la función

$$\mathcal{H}(t) = \sum_{\vec{r}, i=0}^{b-1} (N_i \ln N_i + (1 - N_i) \ln (1 - N_i)) \quad (2.64)$$

no es creciente a lo largo del tiempo,  $(\mathcal{H}(t + 1) \leq \mathcal{H}(t))$ , siendo  $N_i = \sum_s s_i P(s)$  la probabilidad de que la partícula  $i$  esté presente y  $s = (s_0, \dots, s_{b-1})$  un estado de entrada de los  $2^b$  posibles. Ello garantiza que las simulaciones basadas en la ecuación de Boltzmann no pueden diverger hacia regímenes no físicos.

El teorema  $\mathcal{H}$  nos permite mostrar que existe una función de distribución de equilibrio que se puede expresar como resultado de la ecuación de Boltzmann y calcular la solución estacionaria, que será la solución a la que el sistema va a evolucionar espontáneamente cuando tienda al equilibrio. Desde el punto de vista de la teoría de la información, la demostración del teorema  $\mathcal{H}$  local puede ser interpretado de la siguiente forma:

- Inicialmente se proporcionan los  $N_i$  que representan la información dada.
- Se calculan los correspondientes  $P_i$  en la aproximación de Boltzmann y la información no cambia.
- Se realizan las colisiones y se obtienen otros  $P_i$  y ahora la información disminuye o se mantiene constante.
- Se vuelven a calcular los  $N_i$  a partir de los  $P_i$  y aquí de nuevo la información disminuye o permanece constante.

Sin embargo, la existencia de un teorema  $\mathcal{H}$  al nivel de la ecuación de Boltzmann en teoría cinética de gases reticulares requiere solamente la condición de balance semidetallado.

## Capítulo 3

# Modelización del vertido de un contaminante mediante un autómatata de gas reticular

### 3.1 Ecuación Reticular de Boltzmann: Usos e Implementación

Los métodos basados en retículas de Boltzmann para tratar la dinámica de fluidos se originaron a partir de las ideas de los autómatas de gases reticulares. Éstos han sido utilizados ampliamente en el estudio de la hidrodinámica y en los sistemas de reacción-difusión y han demostrado su capacidad como medio original de experimentación donde poder verificar algunas cuestiones de la física estadística. Sin embargo, la necesidad de encontrar una realización eficaz de un gas reticular implicaba la utilización de un principio de exclusión (anteriormente explicado) que limitaba el número de partículas que podían encontrarse en el mismo nodo; además, la aplicación de este principio introducía desgraciadamente fluctuaciones de densidad difícilmente controlables, lo

que hacía muy difícil el acoplamiento entre la hidrodinámica y los procesos de reacción.

Una de las mayores dificultades de los métodos de gas reticular es el alto nivel de fluctuaciones asociadas con el número de nodos, necesariamente limitado, de la red que pueden usarse con los recursos de computación actuales. Normalmente los resultados se presentan como una media sobre "cajas" de malla  $\lambda$  que contienen  $n = \lambda^D$  lugares siendo  $D$  la dimensión del espacio y las fluctuaciones decrecen con un factor de  $n^{-\frac{1}{2}}$ . Se puede demostrar [36] que tanto en el modelo FHP como en el FCHC, el trabajo extra necesario para suprimir las fluctuaciones disminuye con el número de Reynolds y no es importante cuando el número de Reynolds  $Re \rightarrow \infty$ . Sin embargo, existe un valor crítico  $Re_c$  a partir del cual intentar suavizar las fluctuaciones es muy costoso; además, para valores moderados del factor de separación entre la solución requerida y los estimadores para las escalas más pequeñas de flujo  $G$ , se obtienen valores muy elevados del número de Reynolds para los dos modelos anteriormente mencionados, lo cual es imposible de simular con los recursos actuales. Ello hace que muchos trabajos sobre gases reticulares estén limitados por la necesidad de un suavizado de las variables macroscópicas.

Una solución posible fue usar la ecuación de Boltzmann para los gases reticulares, en vez de seguir la evolución microscópica de las moléculas individualmente. De esta forma, se trabaja con funciones de distribución de una partícula, que representan medias de conjunto espaciales sobre un número conceptualmente infinito de sistemas equivalentes y que están, por lo tanto, libre de fluctuaciones. La ecuación reticular de Boltzmann, definida anteriormente, viene dada por

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = N_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(N) \quad (3.1)$$

La variable  $\vec{x}$  funciona sobre nodos discretos de la retícula, usando el mismo procedimiento usado normalmente para describir la evolución microdinámica de las partículas de gas, pero reemplazando las variables Booleanas que representan la presencia o ausencia de partículas por poblaciones medias evaluadas con números reales.

El número de Mach ( $M$ ) representa la relación entre las fuerzas inerciales y las de compresibilidad, de tal manera que flujos con  $M < 1$  son subsónicos y supersónicos cuando  $M > 1$ ; el número de Knudsen ( $Kn$ ) representa la relación entre escalas de longitud, específicamente entre el desplazamiento medio entre moléculas y la escala de la capa límite; si  $Kn \rightarrow 0$ , se admite la hipótesis de continuidad y, por lo tanto, se pueden aplicar las leyes de Newton mientras que si  $Kn \rightarrow 1$  el flujo es de tipo molecular libre y los cálculos se han de realizar en el campo de la teoría cinética [11]. Si estos números adimensionales son pequeños, el operador de colisión  $\Omega(N)$  puede ser simplificado desarrollando la función de distribución en torno a su valor de equilibrio local

$$N = N^{eq} + N^{ne} \quad (3.2)$$

siendo  $N^{eq}$  la función de distribución en el equilibrio, que depende solamente de la densidad del gas  $\rho$  y de la velocidad  $\vec{v}$  y que puede expresarse como un desarrollo en serie de componentes de la velocidad

$$N^{eq}(\rho, \vec{v}) = N_0^{eq} + N_1^{eq} + \dots, \quad (3.3)$$

donde  $N_j^{eq}$  es de orden  $O(|v|^j)$ . La parte que no está en el equilibrio  $N^{ne}$  es como mucho de orden  $O(N_2^{eq})$  para un régimen de flujo hidrodinámico no lineal. Desarrollando el término de colisión

$$\Omega(N) = \Omega^{(0)} + \Omega^{(1)} \cdot (N_1^{eq} + N_2^{eq} + N^{ne}) + \frac{1}{2} N_1^{eq} \cdot \Omega^{(2)} \cdot N_1^{eq} + \dots, \quad (3.4)$$

donde se definen las  $\Omega^{(j)} = \frac{\partial^j \Omega}{\partial N_j^j}$  como constantes evaluadas en  $N = N_0^{eq}$ . Usando la propiedad  $\Omega(N^{eq}) = 0$ , (2.60) puede simplificarse sin perder rigor,

$$\Omega(N) = \Omega^{(1)} \cdot (N - N_0^{eq} - N_2^{eq}) + \dots, \quad (3.5)$$

resultando una ecuación que necesita solamente de la derivada primera del factor de colisión. La derivada es una matriz  $b \times b$  que después de imponer las simetrías de la retícula y la conservación de la masa y el momento, tiene solo dos parámetros independientes para el modelo FHP en  $2D$ , si no tiene partículas en reposo, y tres si las tiene.

Las expresiones para calcular  $N_0^{eq}$  y  $N_2^{eq}$  se pueden encontrar en [24] y en [78]; al formar parte de la función de distribución en el equilibrio, dependen localmente de la densidad y velocidad locales, que se definen en función de  $N$

$$\rho = \sum_{i=0}^{b-1} N_i; \quad \rho \vec{v} = \sum_{i=0}^{b-1} N_i \vec{c}_i. \quad (3.6)$$

De hecho,  $N_0^{eq}$  es una constante igual al valor común  $d_0 = \rho_0/b$  de las poblaciones medias para todos los estados cuando no hay movimiento. La solución de la ecuación de Boltzmann se obtiene de la siguiente forma: dado  $N(\vec{x}, t)$  para todos los nodos de la retícula en un tiempo dado, la ecuación (3.6) determina los valores locales para  $\rho$  y  $\vec{v}$ ; a continuación, se calcula  $N_2^{eq}$  y se introduce en la forma simplificada del operador de colisión (3.5), completándose la actualización moviendo la distribución resultante hacia los nodos vecinos de la retícula, como lo indica la ecuación reticular de Boltzmann (2.57). No se realiza ninguna hipótesis sobre la forma de la parte que no está

en equilibrio  $N^{ne}$ .

Existe un teorema  $\mathcal{H}$  global para la ecuación de Boltzmann usando el operador de colisión simplificado. La nueva entropía, expresada por nodo de la retícula, es de la forma

$$S = \sum_{i=0}^{b-1} \widehat{N}_i^2 + \frac{1 - 2d_0}{d_0(1 - d_0)} \frac{D^2}{b^2 c^4} \sum_{i=0}^{b-1} \widehat{N}_i \left( \sum_{j=0}^{b-1} \vec{c}_i \cdot \vec{c}_j \widehat{N}_j \right)^2, \quad (3.7)$$

donde  $\widehat{N}_i = N_i - d_0$ . El estado de equilibrio, maximizando  $S$  con las hipótesis de conservación de la masa y el momento, es justamente el desarrollo en dos términos de la función de distribución en el equilibrio para la ecuación de Boltzmann completa, que además coincide con el truncamiento usado para obtener el operador de colisión simplificado. Esta entropía no cambia globalmente durante la fase de desplazamiento de evolución del gas reticular y aumenta durante las colisiones, siempre que los autovalores  $\sigma$  de  $\Omega^{(1)}$  verifiquen la condición  $-2 < \sigma \leq 0$ . De hecho, la única parte de  $S$  que cambia durante las colisiones depende solamente de la parte de  $N$  que no está en el equilibrio y es proporcional a  $-\sum_{i=0}^{b-1} N_i^{ne^2}$ , que aumenta cuando se dan las condiciones de los autovalores indicadas anteriormente, excepto cuando exista un equilibrio estricto. Se puede demostrar también que en caso del modelo FHP en dos dimensiones, las condiciones anteriores garantizan la estabilidad lineal local del esquema, independientemente de las reglas de colisión que se escojan.

Higuera y Jiménez (1989), usando la simulación del flujo alrededor de un cilindro circular [37] y utilizando el grupo de colisiones del modelo FHP-III, demostraron que el alto grado de fluctuaciones que aparecen en los modelos microdinámicos de gases reticulares debido al pequeño número de nodos posibles de simular, desaparecían si se usaba la aproximación de Boltzmann. Así, al intentar determinar el número de Reynolds que hace que el comportamiento bifurque hacia la turbulencia, la ausencia de fluctuaciones espurias les permitía

aproximarse a la bifurcación de forma controlada, mientras que usando el modelo FHP era imposible mantener flujos estacionarios, incluso muy por debajo del número de Reynolds  $Re$  que produce la bifurcación, lo cual era debido al elevado forzamiento intrínseco producido por las fluctuaciones microscópicas.

En las simulaciones de un gas reticular mediante la ecuación reticular de Boltzmann, la implementación de las diferentes reglas de colisión puede ser reemplazada adecuando un mínimo número de parámetros en el operador de colisión simplificado, aumentando la flexibilidad del método y permitiendo valores más elevados de  $Re_*$ , parámetro que relaciona  $Re$  y el número de Mach. Se mantienen la mayoría de las ventajas de las simulaciones directas de un gas reticular, es decir, la posibilidad de efectuar las simulaciones sobre ordenadores altamente paralelos y de reproducir flujos en presencia de contornos complejos; no se obtienen errores de truncamiento como los encontrados en los métodos numéricos clásicos y solamente el número de Mach y el número de Knudsen determinan cuán fielmente se reproducen las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos incompresibles.

A partir de que Higuera y Jiménez [36] publicaran la posibilidad de utilizar la ecuación de Boltzmann directamente, han sido muchos los autores que han usado esa metodología. Algunos ejemplos son la aplicación a flujos con geometrías complejas en 3D y a bifurcaciones de un flujo de Poiseuille en 2D [65], o el esquema de retícula de Boltzmann para simular el flujo de un fluido de fase simple en 2 y 3 dimensiones [46], [54]. También se comprobó que la técnica de la retícula de Boltzmann podía ser vista como una técnica de diferencias finitas para las ecuaciones de Navier-Stokes con la propiedad de estabilidad incondicional [25] y se realizó la obtención de aquellas a partir de la ecuación de Boltzmann [71], lo que es conocido como el método de Boltzmann de la retícula o gas reticular de Boltzmann [16]. Finalmente Qian *et al.* pub-

licaron dos artículos [61], [62] en los que proponían unos modelos reticulares, llamados BGK por estar basados en un modelo publicado originariamente en 1954 y cuyo acrónimo responde a las iniciales de sus autores [6], para simular la ecuación de Navier-Stokes hasta una aproximación de segundo orden. Se proponían como alternativa a los modelos de gases reticulares y pueden ser interpretados como un método de relajación en dinámica de fluidos computacional, ya que si bien la ecuación de evolución tiene una forma parecida a la de Boltzmann, aparece un parámetro de relajación que sustituye a la matriz de colisión.

En los últimos años, la ecuación reticular de Boltzmann se ha utilizado también para modelizar fenómenos de advección, difusión y reacción con el fin de simular el comportamiento de un fluido newtoniano atérmico cuya evolución queda enteramente determinada por las ecuaciones de continuidad y de Navier-Stokes [71], [9].

## **3.2 Reticula de Boltzmann para la ecuación de reacción-difusión**

En este trabajo nos limitamos a construir una retícula de Boltzmann destinada a simular una ecuación de reacción-difusión partiendo de que el campo de velocidades del fluido es conocido en cada paso de tiempo. Se supone que el fluido es atérmico y newtoniano, es decir, conserva la misma temperatura y es incompresible cumpliendo la hipótesis de Stokes.

La evolución general de un sistema hidrodinámico sometido a un campo exterior de velocidades está determinada por el sistema de advección-difusión-reacción siguiente

$$j = 1, \dots, g, \quad \frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_j \vec{u} = D_j \nabla^2 \rho_j + F_j(\rho_1, \dots, \rho_g) \quad (3.8)$$

donde las  $\rho_j$  representan, para  $j \neq 0$ , las  $g$  densidades de reactivos presentes en el sistema,  $D_j$  son los diferentes coeficientes de difusión y  $\vec{u}$  la velocidad del fluido; las funciones  $F_{j \neq 0}(\rho_1, \dots, \rho_g)$  son los términos de reacción. Es evidente que si solamente existe difusión,  $\vec{u} = \mathbf{0}$  y  $F_j = 0$  y si no hay reacción,  $\vec{u} \neq \mathbf{0}$  pero  $F_j = 0$ .

Weimar [72] realizó la simulación de un gas reticular reactivo sometido a un flujo externo y encontró que un modelo con principio de exclusión era solamente válido para concentraciones muy bajas de reactivo y para velocidades muy pequeñas; para evitar el problema utilizó un método basado en la ecuación de Boltzmann sin principio de exclusión.

En el modelo que se va a desarrollar, el flujo de partículas no obedece ningún principio de exclusión [9] y por lo tanto hay un número arbitrario de partículas que pueden moverse desde un nodo hacia sus nodos vecinos. Primeramente se estudiará la difusión en un gas reticular para luego añadir la reacción de las partículas con el medio, lo que conlleva intrínsecamente a la advección de las partículas mediante un campo de velocidades externo.

### 3.3 Modelo de difusión en un gas reticular mediante la aproximación de Boltzmann

La ecuación de difusión de un fluido proviene de la combinación de la ecuación de continuidad y de la ley de Fick. Si suponemos que el coeficiente de difusión es constante para un sistema isótropo y homogéneo, se obtiene la ecuación de difusión

$$\frac{\partial x(\vec{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 x(\vec{r}, t). \quad (3.9)$$

donde  $x$  es la densidad y  $D$  el coeficiente de difusión. Se puede verificar que una solución de la ecuación de difusión en dos dimensiones extendido a todo  $\mathfrak{R}^2$  para  $t > 0$  es una campana de Gauss descrita por la ecuación

$$x(\vec{r}, t) = \frac{1}{4Dt} e^{-|\vec{r}|^2/(4Dt)}. \quad (3.10)$$

Si  $t$  tiende a 0, la gaussiana se concentra en un punto y es solución de la ecuación de difusión en todo el plano que tiene como condición inicial la distribución de Dirac  $x(\vec{r}, t = 0) = \delta(\vec{r})$ . La extensión espacial de esta solución está caracterizada por su momento de orden 2:

$$\int_V d\vec{r} |\vec{r}|^2 x(\vec{r}, t) = 2Dt. \quad (3.11)$$

Para  $t > 0$ , la gaussiana tiene todo el espacio como soporte lo que implica un desplazamiento instantáneo de la materia; por lo tanto, estrictamente hablando, la ecuación de difusión descrita anteriormente aproxima los procesos cuando los gradientes de densidad son débiles.

Para reproducir una difusión simple se considera una retícula en la que un gran número de partículas efectúan caminos al azar. El estado de un nodo está caracterizado por

$$S(\vec{r}, t) = \{n_i(\vec{r}, t) : i = 0, \dots, b - 1\} \quad (3.12)$$

en donde los  $n_i$  designan el número de partículas presentes en los canales indicados por  $i$  del nodo situado en  $\vec{r}$ , en el tiempo  $t$ . El canal 0 está reservado para las partículas inmóviles durante un paso de tiempo mientras que los otros canales contienen las partículas que se propagan siguiendo las direcciones in-

dicadas por los vectores  $\vec{e}_i$ ,  $i \neq 0$ , que conectan en la retícula con los nodos vecinos.

La ecuación de difusión se expresa en este contexto en términos de la distribución de probabilidades de la presencia de partículas asignadas a caminos al azar, teniendo en cuenta que la densidad de presencia puede ser considerada como la media normalizada de las partículas presentes en los diferentes nodos de la retícula, suponiendo un número grande de realizaciones. Usaremos una retícula cuadrada cuyo ejemplo se ilustra en la figura 3.1. Los  $\vec{e}_i$  son los vectores de la retícula cuyas orientaciones se corresponden con las direcciones de desplazamiento de las partículas que ocupan el canal  $i$  y que relacionan el nodo con su entorno nodal. Cada nodo posee  $b$  canales ( $i = 0, \dots, b-1$ ) reservándose uno de los canales ( $i = 0$ ) para las partículas que tienen velocidad nula.

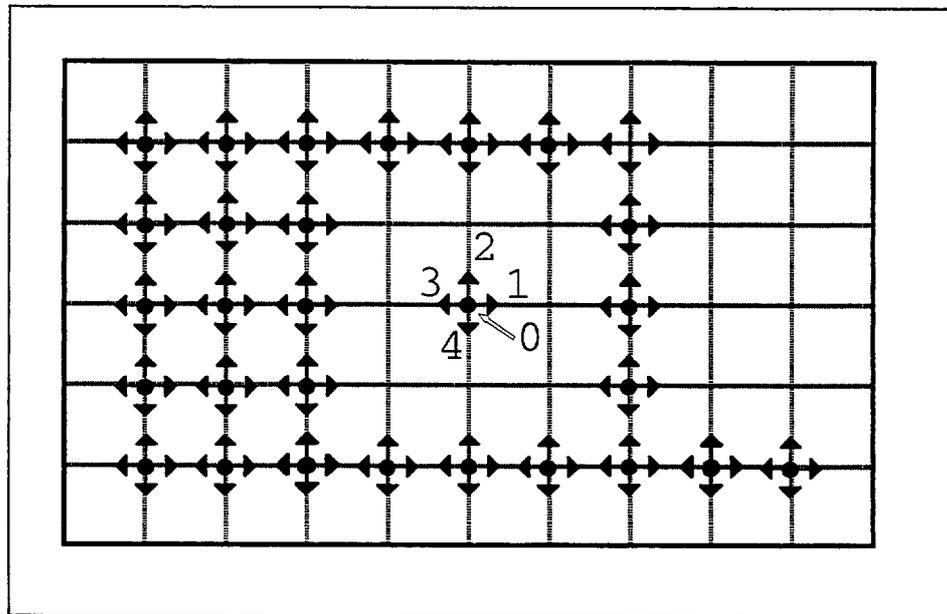


Figura 3-1: Retícula usada para simular la ecuación de reacción-difusión modelizada. Los valores (de 0 a 5) representan los diferentes canales de desplazamiento de las partículas en la dirección representada por el vector correspondiente.

La dinámica de evolución del sistema reticular viene controlada por varios operadores que representan las diferentes etapas por las que pasan los nodos en cada paso de tiempo; los operadores actúan todos de manera sincrónica en toda la retícula. Si llamamos  $\mathcal{L}$  al número de nodos de la retícula, la retícula puede representarse mediante las matrices  $N^{\mathcal{L}}(t)$  o  $N^{\mathcal{L}b}(t)$ .  $N^{\mathcal{L}}(t)$  es una matriz en la que cada elemento representa el número total de partículas presentes en cada nodo de la retícula en el tiempo  $t$  y  $N^{\mathcal{L}b}(t)$  es una matriz en la que cada elemento representa el número total de partículas presentes en cada canal de cada nodo de la retícula en el tiempo  $t$ . Hay tres operadores en este caso para definir la difusión pura, es decir, en ausencia de reacción y/o advección:

**El operador de suma** efectúa una suma de partículas sobre todos los canales de cada nodo para producir una matriz cuyos elementos se corresponden con el número de partículas presentes en cada nodo de la retícula.

$$S : N^{\mathcal{L}b}(t) \rightarrow N^{\mathcal{L}}(t), \quad n(\vec{r}', t) = \sum_{i=0}^b n_i(\vec{r}', t) \quad (3.13)$$

**El operador de redistribución** reparte todas las partículas de un nodo entre sus diferentes canales y lo hace para cada nodo.

$$R : N^{\mathcal{L}}(t) \rightarrow N^{\mathcal{L}b}(t). \quad (3.14)$$

**El operador de propagación** traslada cada partícula a lo largo de la retícula atribuyéndole una velocidad  $k\vec{e}_i$  siendo  $k$  entero.

$$P : N^{\mathcal{L}b}(t) \rightarrow N^{\mathcal{L}b}(t+1), \quad (3.15)$$

$$n_i(\vec{r}' + k\vec{e}_i, t+1) = n_i(\vec{r}', t). \quad (3.16)$$

Luego en el caso de la difusión, la dinámica sobre la retícula está determinada

por la composición de operadores

$$P \circ R \circ S : N^{\mathcal{L}^b}(t) \rightarrow N^{\mathcal{L}^b}(t+1). \quad (3.17)$$

### 3.4 Ecuación de difusión sobre la retícula

A continuación se demostrará que quedan bien reproducidos los fenómenos difusivos utilizando la dinámica anterior. Se considera el caso en que  $k = 1$ , es decir, solo existe propagación entre los nodos vecinos inmediatos y una retícula cuadrada con un canal central con velocidad nula como se nombró anteriormente. Si observamos la evolución de las medias de densidad de presencia de partículas sobre los nodos de la retícula en  $\vec{r}$  en el tiempo  $t$ ,  $n(\vec{r}, t)$  tendremos

$$n(\vec{r}, t + \Delta t) = \frac{1}{5} \sum_{i=0}^4 n(\vec{r} - \vec{e}_i, t) \quad (3.18)$$

$$n(\vec{r}, t + \Delta t) - n(\vec{r}, t) = \frac{1}{5} \left( \sum_{i=0}^4 n(\vec{r} + \vec{e}_i, t) - 5n(\vec{r}, t) \right) \quad (3.19)$$

$$= \frac{1}{5} \left( \begin{aligned} &n(\vec{r} + \vec{e}_x, t) + n(\vec{r} - \vec{e}_x, t) - 2n(\vec{r}, t) + \\ &+ n(\vec{r} + \vec{e}_y, t) + n(\vec{r} - \vec{e}_y, t) - 2n(\vec{r}, t). \end{aligned} \right) \quad (3.20)$$

Reagrupando los diferentes términos, se obtiene

$$n(\vec{r}, t + \Delta t) - n(\vec{r}, t) = \frac{1}{5} \frac{\Delta r^2}{\Delta t} \left[ \begin{aligned} &\frac{(n(\vec{r} + \vec{e}_x, t) + n(\vec{r} - \vec{e}_x, t) - 2n(\vec{r}, t))}{\Delta x^2} \\ &+ \frac{(n(\vec{r} + \vec{e}_y, t) + n(\vec{r} - \vec{e}_y, t) - 2n(\vec{r}, t))}{\Delta y^2} \end{aligned} \right] \quad (3.21)$$

siendo  $\Delta x^2 = \Delta r^2 |\mathbf{e}_x|^2$  e  $\Delta y^2 = \Delta r^2 |\vec{\mathbf{e}}_y|^2$ . La parte izquierda de la ecuación anterior representa la versión discreta de  $\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t}$  y la parte derecha contenida en el corchete es la versión discreta de  $\nabla^2 n(\vec{r}, t)$ . Por lo tanto hemos encontrado una forma discreta de la ecuación de difusión con  $D = \frac{1}{5} \frac{\Delta r^2}{\Delta t}$ .

### 3.4.1 Relación entre la difusión para los medios continuos y para la retícula

La ecuación de difusión de los medios continuos admite soluciones de la forma siguiente

$$x(\vec{r}, t) = A e^{ik\vec{r}} e^{\omega t} \quad (3.22)$$

si se verifica la relación de dispersión  $\omega = -Dk^2$ . Se puede observar que la ecuación de difusión reticular (3.21) admite soluciones de la forma

$$n(\vec{r}, t) = A e^{ik\vec{r}} e^{\omega t} \quad (3.23)$$

si se respeta la relación de dispersión  $\omega = \ln(1 - 2D + 2D \cos(k))$  [20]; es interesante apreciar que la relación de dispersión de los medios continuos  $\omega = -Dk^2$  se obtiene en el límite para números de ondas pequeños ( $k \rightarrow 0$ ).

Se obtiene por tanto un comportamiento difusivo sobre la retícula que se asemeja al comportamiento difusivo en medios continuos para longitudes de onda elevadas en comparación con la distancia entre nodos vecinos y con los grandes tiempos definidos por ellas.

### 3.4.2 Control del coeficiente de difusión

Si existe solamente una especie de partículas que se difunden en la retícula, bastará realizar un cambio de escala para modificar el valor de  $D$ . Si por el

contrario coexistieran varias especies de partículas con coeficientes de difusión diferentes, habrá que proceder de manera diferente. En este último caso, si la retícula contiene  $g$  especies de partículas, el estado de un nodo se caracterizará por  $S(\vec{r}, t) = \{n_i^j(\vec{r}, t)\}$  siendo  $i = 0, \dots, b$  y  $j = 1, \dots, g$ . Por lo tanto habrá que definir los operadores de forma diferente y existen dos métodos: el repetitivo, que es muy costoso en tiempo de cálculo, y el método de salto que permite a las partículas efectuar saltos de diferentes longitudes.

### 3.4.3 Los procedimientos de redistribución

Existen varias versiones del operador de redistribución, es decir, de repartir las partículas de un nodo por los diferentes canales de que disponga [72].

El operador de redistribución *físico* es el que se corresponde mejor con la imagen que se posee de partículas que efectúan caminos al azar por una retícula. Toma todas las partículas de la retícula de una en una y para cada una de ellas realiza una búsqueda al azar (equiprobable e independiente) para encontrar un número de 0 á  $b$  con el fin de saber el canal por el cual se dirigirá la partícula. En este momento las partículas conservan todavía el lugar que tenían en la retícula y no se han movido. El problema surge debido al elevado número de partículas que se deben manipular sobre una retícula (del orden de  $10^6$ ); ello querrá decir que en cada paso de tiempo se deberán realizar un millón de búsquedas al azar, lo cual resulta prohibitivo en términos de tiempo de cálculo. Para mejorar la situación, se determina la distribución que sigue el conjunto de partículas distribuidas en cada uno de los  $b$  canales diferentes y se utiliza un método más eficaz para obtener esta distribución. Por lo tanto en este tipo de redistribución, el número de partículas dirigidas hacia un canal viene dado por una distribución binomial de la forma  $B(n(\vec{r}, t), \frac{1}{b})$  siendo  $n(\vec{r}, t)$  el número de partículas presentes en el nodo  $\vec{r}$  en el tiempo  $t$ .

Si el número de partículas por nodo  $n(\vec{r}, t)$  es muy elevado, se espera que los diferentes canales reciban cada uno como media  $\frac{1}{b}n(\vec{r}, t)$  partículas. El redistribuidor *de varianza mínima* está concebido de manera que se pueda reproducir este comportamiento asintótico. Atribuye directamente a cada canal de un nodo  $\vec{r}$  de la retícula  $\left[\frac{n(\vec{r}, t)}{b}\right]$  partículas; a continuación se buscan al azar  $n(\vec{r}, t) \bmod b$  números enteros entre  $\{1, \dots, b\}$ , designando éstos los canales por los que son distribuidas las restantes partículas; esta operación se realiza para todos los nodos de la retícula. Este redistribuidor genera alrededor de las cantidades de partículas distribuidas uniformemente sobre los diferentes canales una pequeña dispersión  $n(\vec{r}, t) \bmod b \frac{1}{b} (1 - \frac{1}{b})$  cuyo origen es debido a la naturaleza discreta de las partículas. Este redistribuidor se justifica por el hecho de que en el límite, para números grandes de partículas, las dispersiones se pueden desechar frente a las medias de las distribuciones binomiales; en efecto,

$$\lim_{n(\vec{r}, t) \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{n(\vec{r}, t)}}{n(\vec{r}, t)} = 0. \quad (3.24)$$

Existe también un redistribuidor *de varianza controlada* que genera  $b - 1$  números aleatorios siguiendo una distribución normal de la forma

$$N\left(\frac{n(\vec{r}, t)}{b}, \frac{n(\vec{r}, t)}{b} \left(1 - \frac{1}{b}\right)\right). \quad (3.25)$$

A continuación va truncando simétricamente estos números en 0 y en  $2 \left[\frac{n(\vec{r}, t)}{b}\right]$  mediante reiteración del generador de la ley normal si el número obtenido no pertenece al intervalo designado por los bordes de corte. Se suman los  $b - 1$  números y si su diferencia con  $n(\vec{r}, t)$  es inferior a 0, se reproduce todo el proceso; si esto no ocurre, esta diferencia y los otros  $b - 1$  números son reemplazados por los enteros más próximos. Los diferentes canales de un nodo

reciben cada uno de estos números (de partículas); la operación se repite para todos los nodos de la retícula. Este distribuidor se llama de varianza controlada porque las varianzas de las leyes pueden ser ajustadas a voluntad del usuario.

### 3.4.4 Los procedimientos de propagación

Si hay un solo tipo de partícula difundiéndose en la retícula, no es útil que la partículas se propaguen en cada paso de tiempo más allá de sus vecinos inmediatos; en este caso se utiliza simplemente el operador de propagación tal como se definió anteriormente, es decir,

$$n_i(\vec{r} + \vec{e}_i, t + 1) \leftarrow n_i(\vec{r}, t) \quad (3.26)$$

lo que simplemente representa cambios de números enteros entre nodos vecinos.

La situación es diferente si existen diferentes poblaciones de partículas a las que se les vaya a aplicar el método de control del coeficiente de difusión a saltos. En este caso se habla de un operador de propagación *físico*, cuyo principal problema, al igual que en el caso del redistribuidor, es el tiempo de cálculo. Existe también el propagador *global* que consiste en escoger en cada paso de tiempo la distancia que van a recorrer todas las partículas de la retícula; desde un punto de vista operativo es similar al simple ya que lo único que cambia es que la distancia de propagación se sustituye por una constante que puede ser diferente en cada paso de tiempo pero puede dar lugar a inestabilidades parásitas en sistemas de reacción-difusión. En un propagador *local*, se escoge independientemente en cada nodo la longitud del salto, lo que induce fluctuaciones de densidad extremadamente fuertes ya que permite a los diferentes nodos recibir partículas de un número variable de nodos, algo que no sucedía con el propagador global.

### 3.4.5 Condiciones de contorno

La mayoría de las retículas poseen condiciones de contorno *periódicas* pero las hay también de tipo *reflectante* cuyo interés se justifica notablemente en las simulaciones de flujo hidrodinámico. En una retícula cuadrada ( $b = 5$ ), la reflexión tiene lugar sobre una pared imaginaria situada a media unidad de longitud en el exterior de la retícula. Esta condición se manifiesta a través de la operación de propagación. Si la retícula es cuadrada pero con 9 canales, existen dos tipos de reflexión, especular (la superficie reflectante se comporta como un espejo y se corresponde con la simulación de una superficie lisa) y de retorno, en la que se simula una superficie rugosa.

En nuestro caso también se podrían considerar condiciones de *mar abierto*, en las que se considera difusión a través de los bordes de la retícula pero solamente en el sentido de entrada hacia la retícula. Para ello, el número de partículas de un nodo del contorno se calculará en base a los de los nodos vecinos.

Otro tipo de condición de contorno es considerar la frontera como una pared o lámina fina que, en parte o totalmente, se comporta como una *capa límite*. En el caso de una retícula cuadrada rebote y reflexión coinciden, por lo tanto se consideran rebotes en la frontera, y se definen unas reglas de interacción entre las ocupaciones medias (caso Boltzmann) y la frontera. En cada paso de tiempo de simulación se calculan los valores de equilibrio de cada fila cercana al contorno a partir de la fila inferior y superior mientras que se añade una nueva fila al dominio de simulación de la capa límite; después de cada paso de tiempo se ha de representar un gráfico de la variación de la velocidad con respecto a la distancia a la frontera con el fin de saber el número de filas que son ocupadas por la capa límite, cuyo borde superior coincidirá con una velocidad en los nodos igual a la velocidad dada por la simulación (recuérdese que la velocidad

es cero en la frontera y menor que en el flujo creado si pertenece a la capa límite debido a las fuerzas de fricción presentes).

### 3.5 Reacción en la reticula

La mayoría de los autómatas celulares reactivos intentan simular reacciones químicas conocidas y que no sean muy complejas. Para intentar reproducir el fenómeno en un gas reticular se deben conocer las probabilidades de reacción de las distintos tipos de partículas que sirven para representar las diferentes moléculas químicas que intervienen en la reacción. Como hay moléculas que van desapareciendo y otras que se van formando, en la misma etapa se contemplan la formación de unas moléculas y la aparición de otras. Existen varias formas de calcular estas probabilidades y su distribución por los canales existentes en la retícula basadas en el conocimiento de la constante de reacción.

Para modelizar los sistemas de reacción-difusión, existen dos tipos de redes de autómatas celulares. El primer tipo es conocido como autómata de gas reticular reactivo, cuyas partículas se mueven aleatoriamente para simular la reacción y cuya evolución viene descrita por medio de tres operaciones: propagación, colisiones inelásticas y colisiones reactivas. En la reacción, una configuración de partículas  $i$  se transforma en otra  $j$  mediante una probabilidad de transición  $A(i \rightarrow j)$  para  $(i, j = 0, \dots, b)$ ; durante esta operación se crean ( $i > j$ ) o desaparecen ( $i < j$ ) partículas y por lo tanto el operador de reacción no conserva ni el número de partículas ni el momento. Los autómatas reactivos sirven para estudiar fluctuaciones en sistemas grandes, donde lo importante es la evolución macroscópica (por ejemplo, simulación de formas, oscilación, nucleación de ondas químicas), pero este método no es eficiente. Una alternativa que corresponde al segundo tipo son las redes de autómatas celulares de media móvil, que están basadas en una convolución que describe la difusión y que

exigen una discretización para truncar los resultados de la convolución y poder ejecutar la etapa de reacción.

Ahora bien, la gran cantidad de reacciones químicas puras y de origen biológico que se producen en el mar hacen prácticamente imposible su modelización; en un principio habría que desarrollar otro gas reticular que fuera capaz de modelizar las reacciones principales y que sirviera de entrada a cada paso de tiempo del gas reticular de reacción-difusión. Ello implicaría el uso de un ordenador con un gran número de procesadores en paralelo, al cual no tenemos acceso.

En un modelo físico del vertido de un contaminante pasivo se modeliza tradicionalmente el término de reacción como la desaparición de contaminante, la cual viene dada por la degradación bacteriana, que se suele medir con el parámetro llamado  $T_{90}$  que representa el tiempo que tarda en desaparecer por degradación bacteriana el 90% del contaminante una vez vertido al fluido. Es evidente que cuánto más tiempo estén las partículas de contaminante en el medio, mayor posibilidades tienen de sufrir una degradación bacteriana. Ahora bien, este parámetro no es constante y muestra un amplio rango de valores, estando influido principalmente por la luz. Como el modelo simulado representa como máximo la evolución durante 9 horas desde el momento del vertido, este valor se va a tomar constante y se implementará como sigue.

Si la degradación es exponencial, el número de bacterias  $B$  existentes debido al vertido tenderá a cero. La ley de la cinética química dice que la evolución de la concentración de contaminante—representado por la cantidad de bacterias coliformes en este caso—viene dada por la ecuación

$$\frac{d[B(t)]}{dt} = -k[B(t)] \quad (3.27)$$

siendo  $k$  la constante de la reacción. La solución de (3.27) para una condición

inicial  $[B(t)] = [B_0]$  viene dada por

$$[B(t)] = [B_0] e^{-kt}.$$

El valor de  $k$  se puede obtener a partir del valor del  $T_{90}$  por la siguiente relación

$$[B](T_{90}) = 0.1 [B_0]$$

lo que implica que

$$0.1 = e^{-kT_{90}}. \quad (3.28)$$

Suponiendo que conocemos el valor del  $T_{90}$ , podemos calcular  $k$  a partir de (3.28). Para incluir la degradación en la simulación, se multiplica el número total de partículas por nodo por el factor de degradación bacteriana

$$\lambda = e^{-k\Delta t}$$

donde  $k$  es el valor hallado anteriormente y  $\Delta t$  es el paso de tiempo del autómatas. Así, si se considera un  $T_{90}$  de 4 horas, se obtiene un valor de  $k = 1.6 \cdot 10^{-4} s^{-1}$ , y a partir de conocer este valor se puede calcular  $\lambda$  y hallar la degradación por nodo.

El siguiente ejemplo sirve para indicar la sensibilidad de la contaminación pasiva de tipo doméstico en la costa frente a la tasa de degradación bacteriana. Si un vertido llega por una tubería o emisario a una playa de baño con un contenido en coliformes de  $10^8/100ml$ , después de una dilución de orden  $10^3$  y de haber estado 12 horas en el mar, el número de coliformes habrá disminuido hasta  $10^5/100ml$  si no existe degradación bacteriana. Si aplicamos una degradación bacteriana de  $T_{90} = 4 \text{ horas}$  que es un valor típico,

se obtendrá una disminución del número de coliformes en el agua de baño de tal forma que se medirán solamente  $10^2/100ml$ ; sin embargo, si el valor del  $T_{90}$  fuera de 24 horas, el número de coliformes en esa zona de baño sería de al menos  $10^{4.5}/100ml$ , más de 300 veces la estimación anterior [27].

### 3.6 Modelo de reacción-difusión en un gas reticular mediante Boltzmann

Este modelo se parece mucho al modelo de difusión y solamente se necesita aplicar la desaparición de partículas por degradación bacteriana y cambiar el paso de redistribución  $\mathcal{R}$  ; en vez de distribuir las partículas de forma isotrópica, el desplazamiento medio de las partículas se debe de corresponder con el campo de velocidades impuesto  $\vec{v}(\vec{r}, t)$ . Al ser un modelo sin principio de exclusión, en este caso un número arbitrario de partículas pueden moverse desde un nodo hasta sus vecinos o entorno [72].

Para asignar las partículas a los canales, es decir, las direcciones, se pueden usar una serie de probabilidades para el caso de configuración con una partícula, aplicando esta regla de distribución para cada partícula existente en la retícula independientemente. Por lo tanto, cada partícula existente en el nodo  $\vec{r}$ , se mueve al nodo  $\vec{r} + \Delta r \vec{c}_i$  con probabilidad  $\tilde{D} + \frac{1}{2}\tilde{v} \cdot \vec{c}_i$  (siendo  $\vec{c}_i \neq 0$ ), o permanece en el nodo  $\vec{r}$  con probabilidad  $1 - (b - 1)\tilde{D}$ , donde  $\tilde{D}$  y  $\tilde{v}$  representan el coeficiente de difusión y la velocidad en la retícula respectivamente. Esta asignación de partículas a canales (que en este caso tienen capacidad ilimitada) se realiza independientemente para cada partícula.

Para verificar la ecuación macroscópica, escribimos la ecuación microscópica para la evolución de la densidad de partículas

$$x(\vec{r}, t + \Delta t) = (1 - (b-1)\tilde{D})x(\vec{r}, t) + \sum_{i:\vec{c}_i \neq 0} \left( \tilde{D} + \frac{\tilde{v} \cdot \vec{c}_i}{2} \right) x(\vec{r} - \Delta r \vec{c}_i, t) \quad (3.29)$$

y se realiza un desarrollo de Taylor de primer orden en el tiempo y de segundo orden en el espacio. Se obtiene así

$$\frac{\partial x(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\Delta r}{\Delta t} \tilde{v} \cdot \nabla x(\vec{r}, t) + \tilde{D} \frac{\Delta r^2}{\Delta t} \nabla^2 x(\vec{r}, t). \quad (3.30)$$

Si lo comparamos con la ecuación macroscópica

$$\frac{\partial x(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla x(\vec{r}, t) = D \nabla^2 x(\vec{r}, t) \quad (3.31)$$

indica que  $\vec{v} = \tilde{v} \frac{\Delta r}{\Delta t}$  y  $D = \tilde{D} \frac{\Delta r^2}{\Delta t}$ .

El mayor problema que plantea este tipo de modelo es que la distribución de las partículas por los canales requiere realizar una búsqueda aleatoria independientemente para cada partícula. Cuando el número de partículas por nodo es grande, se convierte en un método muy poco eficiente y por lo tanto se ha de escoger una alternativa. Existen varios métodos de aproximación numérica para reproducir exactamente una distribución de tipo multinomial (métodos de aceptación-rechazo) como la que correspondería a la asignación de partículas pero no son muy eficientes para grandes valores del número de partículas  $n$ .

Cuando el número  $n$  de partículas es muy grande o cuando no se quieren investigar fluctuaciones, un método de aproximación es seleccionar una distribución de varianza mínima (explicada anteriormente). Para ello se asignan  $r_i$  partículas al canal  $i$ ,

$$i = 0, \dots, b-1, \quad r_i = \lceil np_i \rceil \quad (3.32)$$

donde la notación  $\lceil \cdot \rceil$  representa el menor número entero mayor o igual que  $np_i$ , redistribuyendo a continuación las restantes partículas, es decir,  $n - \sum_{i=0}^{b-1} r_i$  partículas usando un algoritmo simple de búsqueda aleatoria. Este método requiere como máximo  $b - 1$  búsquedas aleatorias y muy pocos cálculos.

La metodología consiste en escoger un grupo de velocidades que en el caso de la retícula cuadrada con el que se va a trabajar constará de 4 velocidades no nulas correspondientes a los canales numerados del 1 al 4 y una velocidad nula que se corresponde con el canal 0 y que será el que posee las partículas que están en reposo,

$$\vec{c}_0 = (0, 0), \quad \vec{c}_{1..4} = (\pm 1, 0), (0, \pm 1)$$

Las partículas existentes del transporte modelizado mediante la ecuación de un contaminante  $p$  por ejemplo, se distribuyen por los canales de la forma siguiente

$$n_p = \sum_i f_i^p, \quad f_i^p(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \left\{ \begin{array}{l} (1 - 4D_p) n_p, \quad i = 0 \\ (D_p + \frac{1}{2} \vec{c}_i \cdot \vec{u}) n_p, \quad i \neq 0 \end{array} \right\}.$$

De cada nodo salen (o llegan a él) partículas por 5 posibles canales, una de las cuales pertenece a las partículas en reposo (canal 0) y las otras 4 a las cuatro vías definidas por los ejes coordenados X e Y, es decir, hacia la derecha (canal 1), hacia arriba (2), hacia la izquierda (3) y hacia abajo (4). Para evitar inestabilidades, todos los coeficientes deben ser positivos y por lo tanto se debe de cumplir que  $\frac{1}{2} |\vec{u}| < D_p < \frac{1}{4}$  (ver Tabla 3.1).

Luego si consideramos la reacción, difusión y advección, la dinámica completa del transporte viene dada por

CANALES	VELOCIDADES
1 ( $\rightarrow$ )	$D_x + \frac{u_x}{2}$
2 ( $\uparrow$ )	$D_y + \frac{u_y}{2}$
3 ( $\leftarrow$ )	$D_x - \frac{u_x}{2}$
4 ( $\downarrow$ )	$D_y - \frac{u_y}{2}$
0 ( $\bullet$ )	$1 - 2D_x - 2D_y$

Tabla 3.1: Probabilidades por canal en función del coeficiente de difusión ( $D_x, D_y$ ) y de la velocidad del fluido ambiente ( $u_x, u_y$ ).

1. Reacción:

$$\left\{ \begin{array}{l} n'_p(\vec{r}, t) = n_p(\vec{r}, t) - \lambda(t) n_p(\vec{r}, t) = (1 - \lambda(t)) n_p(\vec{r}, t) \\ n_p(\vec{r}, t) = n'_p(\vec{r}, t) \end{array} \right\}$$

2. Difusión y Advección:

$$f_i^p(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) = \left\{ \begin{array}{l} (1 - 4D_p) n_p(\vec{r}, t), \quad i = 0 \\ (D_p + \frac{1}{2} \vec{c}_i \cdot \vec{u}) n_p(\vec{r}, t), \quad i \neq 0 \end{array} \right\}$$

3. Suma o redistribución

$$n_p(\vec{r}, t) = \sum_i f_i^p(\vec{r}, t)$$

lo que definirá la evolución del autómata en cada paso de tiempo.

Es evidente que esta metodología conserva la masa existente en los nodos después de cada colisión si no hay degradación bacteriana, pero no conserva el momento debido a la existencia de un campo de velocidades exterior al sistema.

## 3.7 Simulación del modelo de gas reticular de un vertido de contaminante

### 3.7.1 Introducción

El problema que nos ocupa se refiere al estudio de la situación global en un área de interés, más que a pequeñas fluctuaciones locales en el interior de ella. Por tanto, las magnitudes utilizadas son promedios, lo que lleva a utilizar autómatas sobre una retícula de Boltzmann.

La idea consiste en simular el comportamiento de la pluma visible de un vertido en superficie de un vertido de aguas residuales al mar. Puede tratarse de un vertido directamente en el mar (por ejemplo el caso de la Avda. Marítima de Las Palmas en algunas ocasiones, empresa EMALSA) o a través de un emisario (como en el caso del emisario de Las Palmas es situaciones normales, empresa EMALSA, o el del Barranco Seco en Maspalomas, empresa ELMASA). Es razonable suponer, que si se decide verter en determinada área se habrán hecho los estudios necesarios para asegurarse que la dilución sea máxima y que la hidrodinámica marina no provoque la llegada de contaminación hacia las playas de uso recreativo. Ahora bien, con el tiempo se pueden comenzar a usar playas que antes no se utilizaban debido a intervenciones en el litoral (caso de La Laja) o puede fomentarse el uso del mar para deportes marítimos (por ejemplo, vela o wind-surfing en Las Alcaravaneras).

Cuestiones meteorológicas tales como inflexiones en la dirección del viento (caso del tiempo del Sur en Las Alcaravaneras) pueden aumentar el contacto del usuario con zonas próximas al vertido ó pueden propiciar el acercamiento del vertido hacia la costa haciendo peligrar la calidad del agua. Evidentemente, este problema y otros similares, que son de carácter periódico o casi periódico, tendrán que tenerse en cuenta en el diseño y planificación de los vertidos.

Por tanto conviene poder simular lo que ocurre en un área costera más amplia que la ocupada estrictamente por la playa, pero que puede ser influenciada por el vertido, con el fin de conocer los niveles de contaminación existentes en cada paso de tiempo, incluyendo en la simulación el poder alterar las condiciones iniciales y de contorno según los casos expuestos anteriormente, en especial la variación de las condiciones hidrodinámicas.

### 3.7.2 Etapas del proceso

Una vez sentadas las bases teóricas que permiten representar mediante un gas reticular la evolución de las magnitudes que miden la calidad del agua, se procede a formular el modelo mediante un programa de ordenador.

El programa simula los procesos de advección y difusión de una carga contaminante pasiva que puede ser conservativa ó no, según se considere actividad de degradación de tipo bacteriano o no, y que es vertida al mar directamente o a través de un emisario. Se emplea un modelo en dos dimensiones dado que lo interesante, desde el punto de vista estético, es el estudio de la mancha superficial.

La programación se realiza en lenguaje C [4] y la ventana gráfica de visualización de la evolución del contaminante se implementa usando el software XMEGAWAVE desarrollado por el Departamento de Informática y Sistemas de la ULPGC [3]. Se disponen solamente de estaciones de trabajo Hewlett Packard, modelo Apollo, Series 700, para ejecutar el programa que simula el modelo; por lo tanto, el área máxima de trabajo será de 528 nodos de largo por 128 de ancho, representando la distancia entre nodos consecutivos de 10 metros tanto en la horizontal como en la vertical por reproducir una red cuadrada ó cuadrícula. Ello equivale por lo tanto a una superficie de 5.280 m de largo por 1.280 m de ancho, más que suficiente para simular la mayor parte de las playas

próximas a Las Palmas.

Las etapas de generación del modelo son las siguientes (ver figura 3.2):

1.- Definir un espacio bidimensional que representa la franja costera cercana a una playa, el cual se recubre mediante una malla (cuadrada en este caso). Se va a suponer que las partículas del fluido que se está modelizando están situadas en los nodos formados por la retícula. La red representa el mar y el número de partículas que haya en cada nodo se tomará como medida de la contaminación, luego cuando no haya contaminación habrá 0 partículas. El número máximo de partículas por nodo será de 10000, lo que indicará una contaminación muy alta; cuánto mayor sea este valor, menos fluctuaciones habrá. Al tener muchas partículas, la concentración tiene una variación menos abrupta y en el límite de infinitas partículas la función es de hecho continua.

2. Crear un fichero con los parámetros de entrada que reflejarán los valores que pueden ser cambiados para cada simulación dependiendo de las condiciones iniciales de fuente del contaminante y de velocidad y difusión iniciales. En general, los parámetros serán: a) el tiempo máximo de simulación, b) un parámetro que indica cada cuántos pasos de tiempo se ha de crear un fichero de salida, c) la contaminación máxima para inicializar los nodos por los que penetra la contaminación, d) el número de columnas y filas por las que entra el contaminante inicialmente y/o en cada paso de tiempo, e) el lugar por donde sale la contaminación que estará representado mediante un dígito que indicará si inicialmente la contaminación aparece en superficie al lado de la costa, en el punto más alejado ó en mitad de la anchura del área modelizada, f) las componentes horizontal y vertical de la velocidad y del coeficiente de difusión, aunque en general se considera que este último tiene el mismo valor en la horizontal que en la vertical .

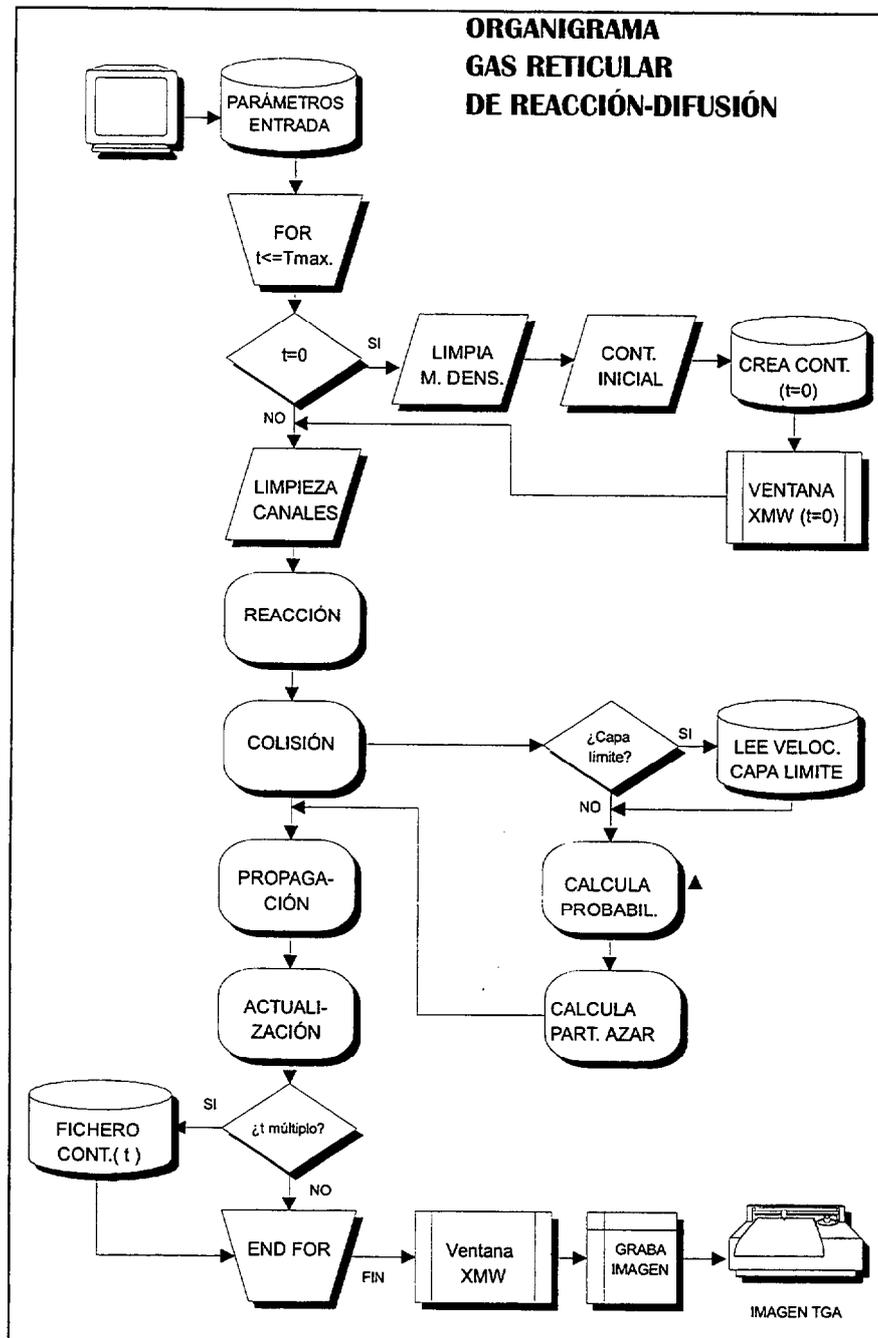


Figura 3-2: Organigrama del proceso de simulación de un vertido de contaminante en la costa mediante un gas reticular de Boltzmann.

Si estos valores cambian, pueden darse por pantalla y actualizarse cada vez que se den determinadas circunstancias. Este fichero servirá también para añadir otros parámetros de entrada que sean de interés.

3.- Imponer unas condiciones iniciales adecuadas, lo cual consiste en general en inicializar determinados nodos, correspondientes a una zona de llegada de la contaminación, bien por vertido directo ó por flotación procedente del emisario submarino, con el máximo valor de ella. Así, por ejemplo, se puede inicializar el sistema considerando una columna contaminada que puede estar situada cercana a costa porque se vierte directamente ó se puede considerar que se vierte por emisario y por lo tanto aparece a cierta distancia de ella.

4.- Llevar a cabo la evolución en cada paso de tiempo y para todos los nodos, lo cual viene dado aplicando los operadores descritos en el capítulo anterior, correspondientes a cada una de las 4 etapas siguientes: la etapa de degradación bacteriana, una etapa de distribución ó colisión, otra de propagación y finalmente una de recolección ó redistribución. A continuación se describe en detalle algunas etapas (Figura 3.3) :

**a) Etapa de degradación bacteriana**

Sería la etapa de reacción, es decir, cuando puede haber una variación del número de partículas en cada nodo. Al ser un modelo físico de dispersión solamente se tendrá en cuenta la desaparición de partículas debido a la degradación bacteriana. Su implementación se realiza para cada nodo y es función del tiempo, lo que en general implica que la probabilidad de degradación va a ser como consecuencia función del número de colisiones sufridas. La desaparición de bacterias coliformes en el mar sigue una distribución exponencial que es función del tiempo que haya transcurrido desde que se vertió en el medio; en el modelo simulado, el número de partículas decrece exponencialmente con el tiempo que ha estado en la red, pero la proporción de partículas que desaparece

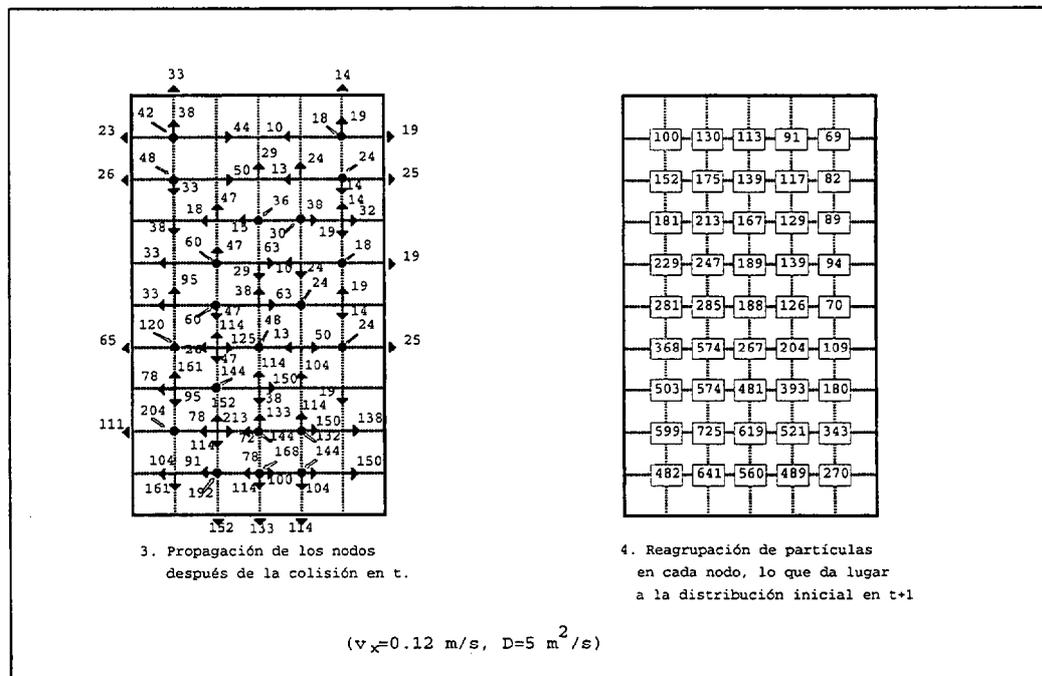
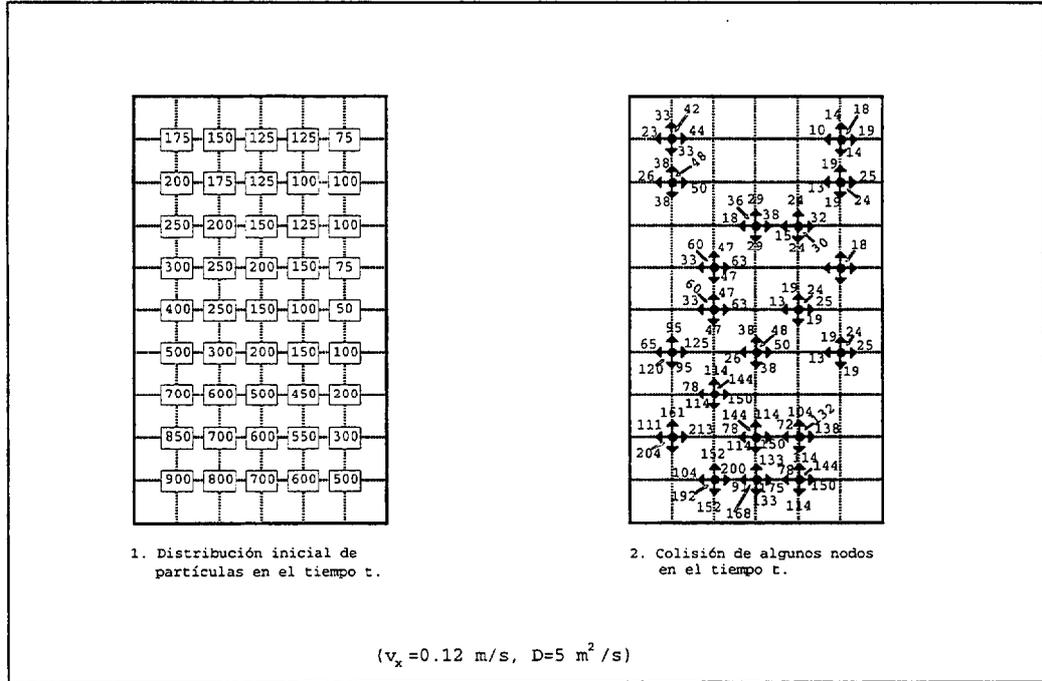


Figura 3-3: Etapas que debe realizarse en los nodos para cada paso de tiempo del autómata de gas reticular.

en cada paso de tiempo es la misma. Esta etapa será la primera al iniciarse cada paso de tiempo y se llevará un contaje del número de partículas degradadas

#### **b) Etapa de colisión**

Cada canal tiene asignada una probabilidad que se obtendrá usando una tabla que tiene definidas estas probabilidades en función del coeficiente de difusión y de la velocidad que tenga el fluido (ver 3.5). Por lo tanto, es posible calcular las probabilidades si cambia la velocidad a lo largo de la simulación. El número de partículas que irán por cada uno de las 5 canales mencionados será el producto del número total de partículas que haya en el nodo precedentes del paso anterior por la probabilidad obtenida para esa dirección. Se considera una etapa instantánea, sin paso de tiempo. Como resultado de trabajar con números enteros usando probabilidades (números en coma flotante) tendremos errores de redondeo; como estos errores no pueden evitarse, lo que se hace es controlarlos. Así, si la suma de las partículas que van por cada dirección no es igual al número total de partículas que había en el nodo, no se conservaría la masa lo que va en contra de la dinámica de un gas reticular de este tipo. La diferencia de partículas será el número de ellas que habrá que decidir por cual de los canales irá; esto se hace asignando cada partícula a un canal al azar mediante una técnica aleatoria, sumando a cada canal las correspondientes partículas.

#### **c) Etapa de propagación**

Para simular la advección, después de la colisión se trasladan las partículas a una distancia de un nodo siguiendo el canal que lleven. Tras esta etapa ya se considera que ha habido un paso de tiempo. Ahora bien, si esta etapa hace que las partículas se salgan del contorno, hay que contabilizarlas con el fin de mantener la masa de contaminante si éste es conservativo. Además, se ha

de tener en cuenta que del contorno pueden llegar partículas hacia el área de modelización debido a la difusión.

#### **d) Etapa de redistribución**

A continuación se sumará el total de partículas que han entrado al nodo por cada canal y por lo tanto se conocerá la contaminación existente en él en ese instante. Si, al igual que en el paso anterior, los nodos pertenecen al contorno por el que penetra la contaminación, el valor que tomarán vendrá dado por el vertido y no por el valor hallado en la simulación. En otras palabras, dependiendo de las condiciones del vertido, se reinicializarán determinados nodos en cada paso de tiempo si el vertido es continuo ó cada cierto lapso de tiempo si el vertido es a pulsos; es evidente que si ha sido un vertido puntual, seguirán la dinámica de los nodos restantes.

5.- Aplicar **las condiciones de contorno** cuando los nodos pertenezcan al borde de la zona de modelización. Las condiciones de contorno utilizadas en este problema son de mar abierto en la zona más alejada de costa y en la zona de aguas abajo y arriba del vertido ya que tomamos una zona próxima a costa. Se ha tomado una condición de tipo lineal en la que cada nodo del borde tiene una contaminación que es función de los dos nodos más próximos a él situados en el interior del área modelizada y en línea recta. Una excepción es el caso en que el vertido penetre por uno de los contornos, ya que se considera que en los nodos pertenecientes a esa zona se vierte siempre una contaminación máxima; esta condición puede cambiarse por supuesto si se considera que la carga contaminante llega a pulsos hasta el mar. En un principio todos los nodos sufren las cuatro etapas del proceso pero en los del borde solamente se tienen en cuenta las partículas que vienen hacia el área modelizada en dirección perpendicular al contorno. Estas condiciones pueden cambiarse sin ningún problema a lo largo de la simulación de una manera muy sencilla, siendo ésta

una de las grandes ventajas en este tipo de modelización.

El área correspondiente a costa, debido al rozamiento, será dónde la velocidad del fluido tenderá a cero y dónde es previsible que se acumule la carga contaminante. Por lo tanto, la velocidad decrecerá a medida que los nodos estén más cercanos a costa. Para simular esto, el valor de la contaminación en este contorno va a venir dado por la media de los 4 nodos situados en la vertical por encima de él y además hasta los nodos más cercanos a costa notarán la presencia de ésta y seguirán una perfil parabólico de velocidades horizontales, similar a una capa límite. Cuando se forma una estructura de capa límite en un fluido, su anchura se hace mayor a medida que nos alejemos del punto inicial de referencia (inicio de la costa modelizada en este caso), siendo ésta una función precisamente de la distancia [48]. En este caso la anchura va de 1 a 11 nodos en el eje Y, correspondiendo estos valores a los nodos 0 a 10 del eje X, es decir, de la costa; a partir del nodo 10, la curva no varía prácticamente y por lo tanto los valores de las probabilidades son iguales (Figura 3-4). Las curvas usadas representan la variación de la velocidad en el nodo de la capa límite con respecto a la velocidad existente en el fluido en la zona exterior a ella [5] y se calculan para cada nodo del eje X mediante  $= \operatorname{erf} \left( \frac{y}{\sqrt{4\nu x}} \right)$  siendo  $\nu$  la viscosidad cinemática,  $u$  la velocidad correspondiente en el nodo de la capa límite,  $u_0$  la vlocidad exterior a la capa límite,  $x$  va en la dirección de la costa e  $y$  indica la dirección hacia mar abierto.

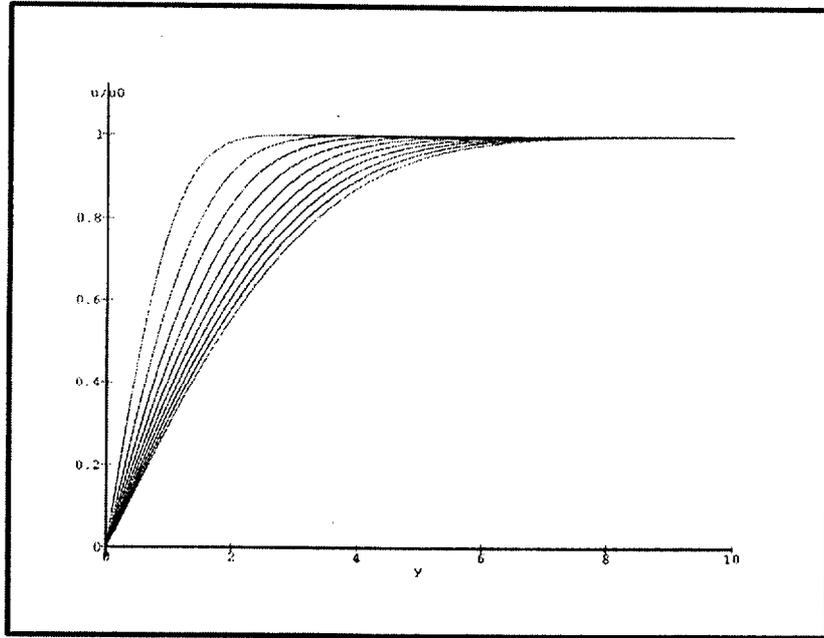


Figura 3-4: Curvas usadas para representar la variación de la velocidad en los nodos de la zona considerada de capa límite; de izquierda a derecha aparecen las curvas correspondientes a los valores de  $x=1$  hasta  $x=10$ .

Al no depender de la velocidad serán las mismas curvas cualquiera que sea la velocidad exterior a la capa límite y bastará multiplicarla por ella para obtener la velocidad en cualquier nodo  $(x, y)$  que pertenezca a la capa límite.

6.- Realizar **una representación visual** haciendo que un rango de valores de contaminación se corresponda con un determinado color para cada nodo en cada paso de tiempo.

A continuación, se usa un programa en X-Windows para representar la ventana de simulación de tal forma que se pueda ver en tiempo real la evolución de la contaminación en el área modelizada. Para ello se emplea el programa citado antes (XMEGAWAVE) que permite ver la evolución en el tiempo y en el espacio de la difusión y advección del vertido.

## Capítulo 4

# Resultados experimentales

### 4.1 Catálogo de información disponible

Se dispone de datos de varios correntímetros procedentes de muestreos realizados por el Departamento de Física de la Universidad de Las Palmas a los que se nos ha permitido tener acceso para poder conocer los valores usuales de la velocidad de la corriente reinante en la zona de vertido, tanto en módulo como en dirección. Estos correntímetros fueron instalados frente a la Avda. Marítima de Las Palmas, a la altura de San Cristobal, y cercano al Dique Reina Sofía del Puerto de La Luz pero en la parte exterior al puerto, también en Las Palmas (Figura 4.1, mapa de la derecha).

Cerca del Dique Reina Sofía se instalaron 3 correntímetros a 10, 25 y 40 m. de profundidad, que estuvieron midiendo datos del 9/7/91 hasta el 27/10/91. En San Cristobal se realizó el anclaje de dos correntímetros, a 15 y 22.5m respectivamente y que recogieron datos desde el 27/3/90 hasta el 16/7/90.

Un correntímetro mide la velocidad reinante en ese lugar, la cual es evidentemente consecuencia de varios fenómenos superpuestos, como son vientos, mareas, corrientes internas, etc.

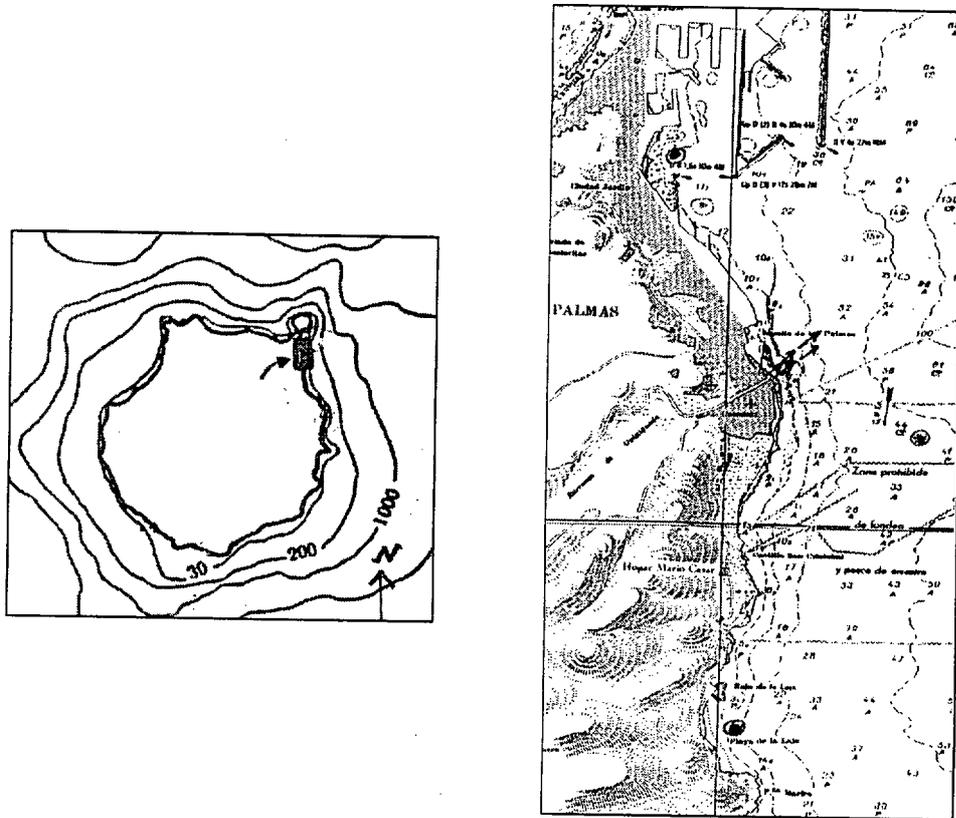


Figura 4-1: En el mapa de la izquierda se muestra la isla de Gran Canaria, indicando con la flecha el área de simulación. En el mapa de la derecha se observa una ampliación de la zona del modelo con playas nombradas (marcadas al Norte y al Sur) y en el centro el asterisco indica la zona de toma de datos; las flechas en el centro de la imagen muestran la salida del vertido.

Los valores de velocidad de corriente obtenidos a una profundidad de 10 m muestran un rango entre 0.02 y 0.3 m/s, con gran variabilidad, tanto a lo largo del día como durante el mes medido. También se aprecia claramente que no siempre se puede decir que la corriente reinante en la zona es la de Canarias y que va hacia el Sur (playa de La Laja), pues se observa en la serie vectorial de corrientes que en muchas ocasiones va hacia el Norte, lugar donde se encuentra la Playa de Las Alcaravanas.

En un estudio sobre ondas de marea realizado alrededor de la isla de Gran Canaria [49], se demostró que la corriente mareal en la isla tiene una dirección paralela a la costa predominantemente y además en la zona en la que se tomaron los datos, tiene muy escasa importancia. Por ello, y porque además las simulaciones se seguirán como máximo durante 8 horas, ya que es el tiempo en que la evolución de la simulación se puede observar en el recinto simulado, no se tendrán en cuenta las variaciones debidas a la marea.

Por otro lado, y para centrarnos más en la zona de vertido, se disponen de datos de velocidad de corriente (módulo y dirección) a diferentes profundidades (3, 5, 10, 15, 20, 25 y 30 m.) así como la salinidad y la temperatura. Estos datos fueron tomados del 14 al 19/12/95 frente a La Avenida Marítima de Las Palmas, a la altura en superficie del emisario submarino situado en un fondo de 40 m por la profesora de Contaminación del Departamento de Física en sus clase de Prácticas de la asignatura. Los valores de las velocidades de corriente obtenidas, tanto en módulo como en velocidad, son del mismo orden a las tomadas con los correntímetros anteriormente nombrados y la temperatura y salinidad presentaban valores de unos  $20^{\circ}$  y alrededor de  $37.2^{\circ}/_{\infty}$  respectivamente. Los datos más recientes que se disponen de la zona son de mediados de Febrero a mediados de Marzo de 1996, recogidos a 3m de profundidad en el mismo lugar y por la misma persona. Los valores de la serie vectorial de corrientes y de vientos de este muestreo se muestran en las figuras 4-2(a) y 4-2(b). Por lo tanto, se puede apreciar que valores de velocidad de la corriente entre 2 y 30 cm/s en las direcciones Sur, Norte y el rango que va desde el Norte-Noroeste hasta el Noreste-Este, representan las condiciones más habituales que pueden encontrarse en el tramo de la Avenida Marítima de Las Palmas que va desde la Playa de Las Alcaravaneras hasta la Playa de la Laja.

CORRENTIMETRO ( PUERTO LA LUZ Z=3M )  
 17- 2-96 al 16- 3-96 (1342 datos, 30 minutos )  
 Serie vectorial de corrientes

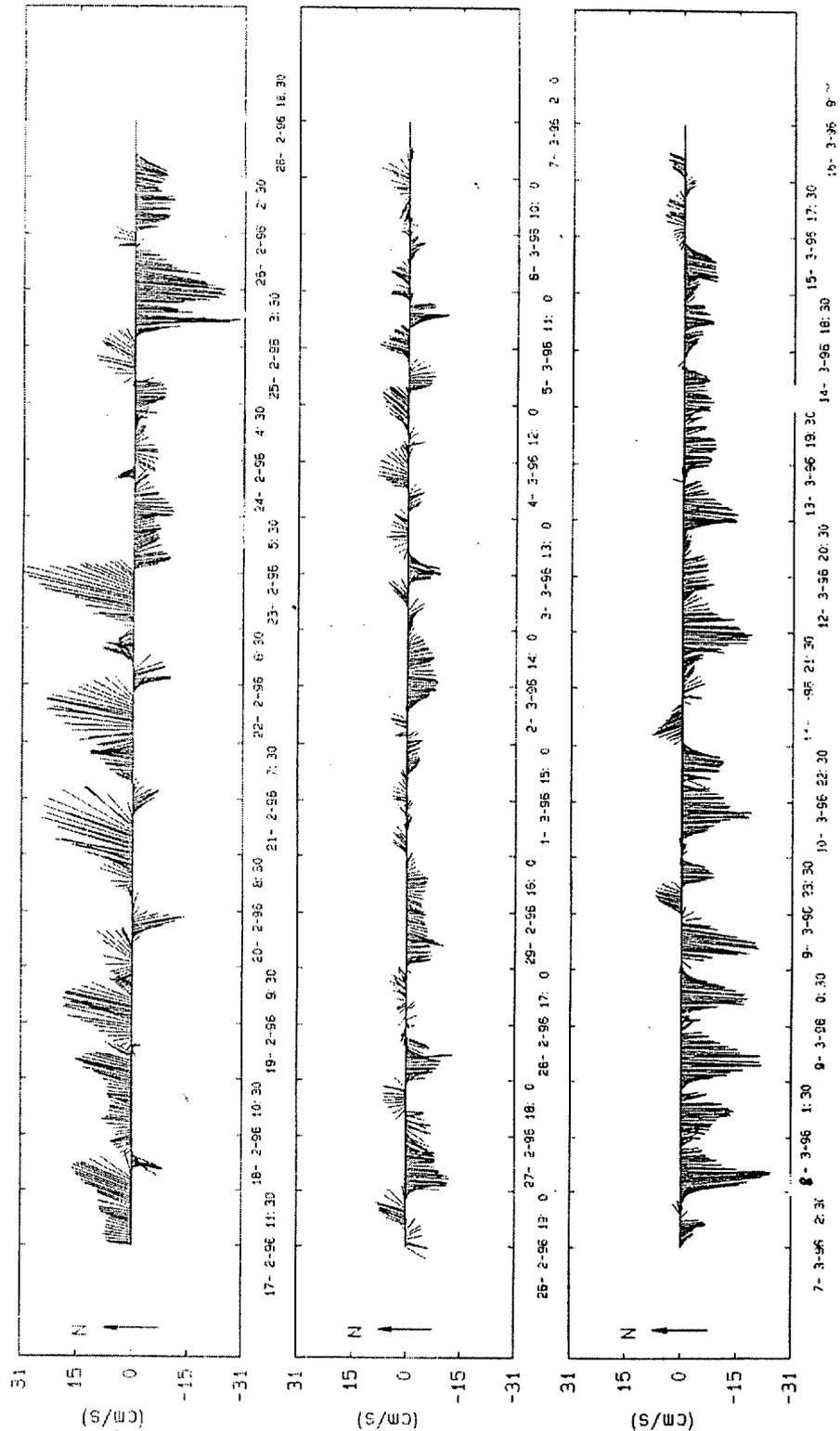


Figura 4-2(a): Evolución de la dirección e intensidad de la corriente reinante en la zona en Febrero y Marzo de 1996. Datos tomados a 3 metros de profundidad.

ESTACION METEOROLOGICA ( PUERTO LA LUZ )  
 17- 2-96 al 16- 3-96 (1390 datos, 30 minutos )  
 Serie vectorial de vientos

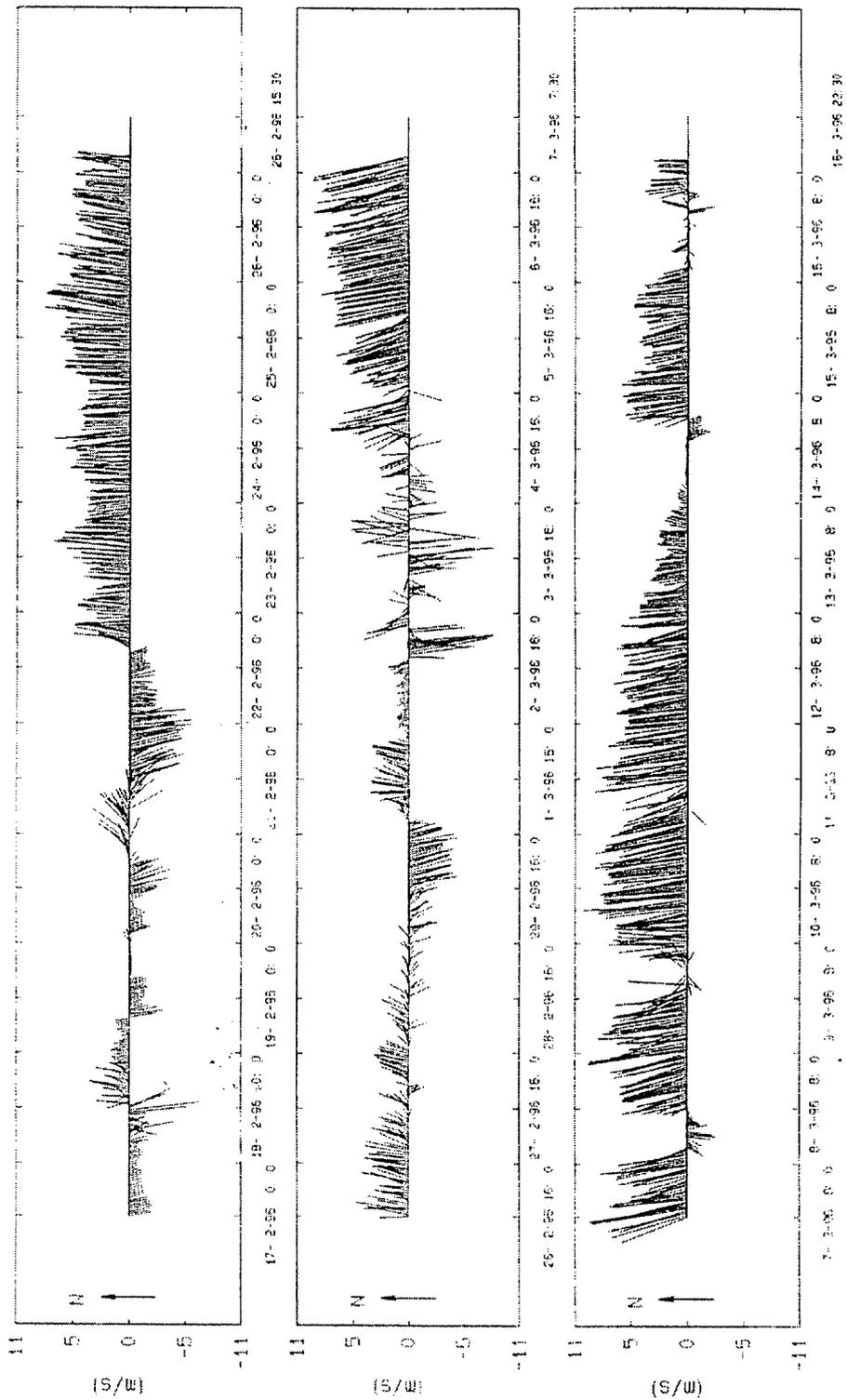


Figura 4-2(b): Evolución de la dirección e intensidad del viento reinante en la zona en Febrero y Marzo de 1996. Datos tomados a 10 metros de altura.

## 4.2 Casos simulados

Si bien la ciudad de Las Palmas cuenta con una estación depuradora de residuos domésticos y con un emisario submarino situado a 2 km de la Avenida Marítima para verter el agua no depurada, surgen con frecuencia problemas derivados de la salinidad (se necesita un rango determinado para el tratamiento primario) y de la presencia de arena en exceso (atasco de las salidas del emisario) en el agua residual, lo que impide su salida por el emisario. En estos casos, el agua se vierte directamente al mar en un área cercana a la Avenida Martima, lo cual puede ser pernicioso para el usuario de las playas cercanas si las condiciones oceanográficas y/o metereológicas favorecen la permanencia de las materias contaminantes en la costa. Por lo tanto se ha utilizado esta situación real para verificar el comportamiento del modelo, usándose los parámetros oceanográficos habituales encontrados en esa zona. Con ello se intenta conocer tanto la calidad del agua como el tiempo que tarda en llegar determinada concentración de coliformes totales al área de interés.

Con el fin de comprobar la validez del método, se han realizado diversas simulaciones de vertidos en superficie, ya que en primera aproximación se considera un modelo bidimensional y, por lo tanto, se intenta reproducir la evolución de la mancha contaminante en superficie. Se han realizado las simulaciones con residuos no conservativos, es decir, existe una degradación de carácter bacteriano propiciada por la luz y porque el vertido es de tipo orgánico. Siempre se ha considerado que la contaminación es pasiva y que no existe estratificación de densidades en la vertical, lo que equivale a decir que la columna de agua estaba bien mezclada y posee la misma densidad. El cálculo de la velocidad, difusión y paso de tiempo en la retícula se realiza, tal como

se nombró en los capítulos anteriores, a partir de los valores microscópicos de estas variables y del espacio entre nodos contiguos en la retícula. La retícula simulada tiene una distancia entre nodos de 10 metros; la difusión ( $D$ ) a nivel de retícula viene dada por

$$D = \frac{\Delta t}{2b} \sum_{i=0}^{b-1} c_{i,x} \cdot c_{i,x} = \frac{\Delta t}{2b} [c_{0,x}^2 + c_{1,x}^2 + c_{2,x}^2 + c_{3,x}^2 + c_{4,x}^2]$$

donde  $b$  es el número de canales (5 en este caso) y  $c_{i,x}$  la velocidad horizontal en cada nodo. Los valores  $\Delta x$  y  $\Delta t$  representan los pasos en el espacio y en el tiempo respectivamente. Si inicialmente la velocidad es horizontal, es decir, paralela a la costa,

$$D = \frac{\Delta t}{2b} \left[ 0 + \left( \frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2 + 0 + \left( -\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2 + 0 \right]$$

lo que da como resultado

$$D = \frac{(\Delta r)^2}{b\Delta t}$$

Conociendo el paso en el espacio y la difusión que se quiere simular, se obtiene el valor del paso de tiempo; así, para una difusión de  $5m^2/s$  se obtiene un paso de tiempo de 4 segundos, es decir, cada paso de tiempo simulado se corresponden con 4 segundos reales. Por lo tanto, en este caso, se necesitan 900 pasos de tiempo reticulares para simular una hora del proceso real. La velocidad y difusión reticulares que se corresponden con una velocidad de  $0.12m/s$  y una difusión de  $5m^2/s$ , se calculan mediante

$$v = \tilde{v} \cdot \frac{\Delta r}{\Delta t}, \quad D = \tilde{D} \cdot \frac{(\Delta r)^2}{\Delta t}$$

siendo  $v$  y  $D$  la velocidad y difusión a nivel macroscópico y  $\tilde{v}$  y  $\tilde{D}$  la velocidad y difusión reticulares. Siguiendo el ejemplo anterior, se obtiene un valor de  $\tilde{v}$

de 0.048 y una difusión de 0.2 en unidades de retícula, que además mantiene la relación impuesta  $\left(\frac{1}{2}|\tilde{v}| < \tilde{D} < \frac{1}{4}\right)$  por el método para asegurarse de que los valores de las probabilidades de distribución por los canales de la retícula sean positivos.

Se ha hecho una equivalencia entre el máximo número de partículas presentes por nodo y los valores legales de coliformes totales (CT) para mantener la calidad de las aguas de baño. Se supone que la ciudad de Las Palmas posee unos 300.000 habitantes cuyo consumo (máximo) es de 200 l por habitante y día, lo que supondría una carga residual máxima de 60.000 metros cúbicos al día, es decir, que se producen como máximo 16.7 metros cúbicos por segundo. Como hay una estación depuradora y un emisario, supondremos que solamente una pequeña parte es vertida directamente al mar, y por condiciones de comparación del modelo, lo hará de forma constante y continua. Partiremos de un modelo que vierte a una velocidad de  $0,8m/s$  por una tubería de  $1m^2$  de superficie, lo que supone un caudal de llegada al mar de  $0,8m^3/s$ .

Supondremos que el agua residual posee una carga contaminante de  $10^6$  CT/100ml, lo que multiplicado por el caudal, dará una carga de  $2.88 \times 10^7$  CT/hora. En la simulación del modelo para una difusión de  $5m^2/s$  se vierten en una hora, a través de los 45 nodos inicialmente contaminados con 10.000 partículas por nodo,  $405 \times 10^6$  partículas por hora; luego cada partícula representa aproximadamente 0.07 CT, lo que quiere decir que una carga contaminante de  $10^6$  CT/100ml equivale a decir que existen 0.07 CT por partícula. La legislación vigente indica que no se pueden sobrepasar valores de  $10^4$  CT/100ml en zonas de aguas de baño en el 95% de las mediciones realizadas en un mes (mínimo bimensual); el vertido original tendrá que sufrir por lo tanto una dilución de  $10^2$  al llegar a una zona de aguas de baño (caso de La Laja y Las Alcaravaneras en nuestro caso) para no superar los valores máximos vigentes.

<i>Difusión</i> ↓ \ <i>Velocidad(m/s)</i> →	0.12	0.05	0.2
$D_x = D_y = 5m^2/s (\rightarrow S)$	SIM-1	SIM-5	SIM-7
$D_x = D_y = 5m^2/s (\rightarrow N)$	SIM-2	SIM-6	SIM-8
$D_x = D_y = 10m^2/s (\rightarrow S)$	SIM-3	-	-
$D_x = D_y = 5m^2/s (\searrow NE, \rightarrow N)$	SIM-4	-	-

Tabla 4.1: Simulaciones realizadas con diferentes valores de intensidad y dirección de la velocidad en el fluido ambiente (N=Norte, NE=Noreste, S=Sur), variando en algunos casos la difusión D.

La tabla 4-1 muestra algunas de las simulaciones realizadas para las diferentes velocidades y difusiones habituales en el medio. Cada simulación se realizó como máximo hasta 7200 pasos de tiempo, es decir, se simularon hasta 8 horas desde la salida del vertido y se supone que se estuvo vertiendo continuamente. En todas las simulaciones el vertido se realizó a 1500 m (nodo 150) del borde oeste de la costa, considerando que el observador está mirando hacia el mar y situado en ella; de esta forma se intenta representar de una manera más real la situación de las playas cuya calidad de aguas de baño se quiere controlar con respecto al lugar de vertido de las aguas residuales.

La primera columna de la tabla 4-1 representa las diferentes simulaciones para un valor medio de la intensidad de la velocidad existente, realizando variaciones en su dirección; el último caso, SIM-4, contempla un cambio en la dirección de la velocidad existente en el fluido (de NE a N) después de una hora de vertido. Para el caso de una velocidad pequeña se presentan dos simulaciones en las que se puede apreciar una potente intrusión en contra de la corriente de la pluma formada debido a la gran diferencia de velocidad existente entre la velocidad de salida del vertido y la velocidad ambiente. La

Número de partículas	Color
0	Azul turquesa
1-2500	Azul grisáceo
2501-5000	Verde grisáceo
5001-7500	Beige
7501-10000	Ocre
> 10.000	Negro

Tabla 4.2: Representación de la contaminación en las figuras de color que se presentan en las páginas siguientes (Fig. 4.3 a 4.10).

última columna representa las simulaciones correspondientes a una velocidad más alta, que también se encuentra en determinados momentos en esa zona.

Se deberá conocer como varía la contaminación en cada simulación con el tiempo y cuánto tiempo tarda la contaminación excesiva en llegar a la playa. Para ello se han realizado figuras en color en las que se aprecia la evolución de la contaminación, la cual viene dada por el número de partículas de contaminante presentes en cada nodo. En las Figuras 4-3 a 4-10 se representa cada rango de número de partículas por un determinado color de acuerdo con la tabla 4-2.

---> v

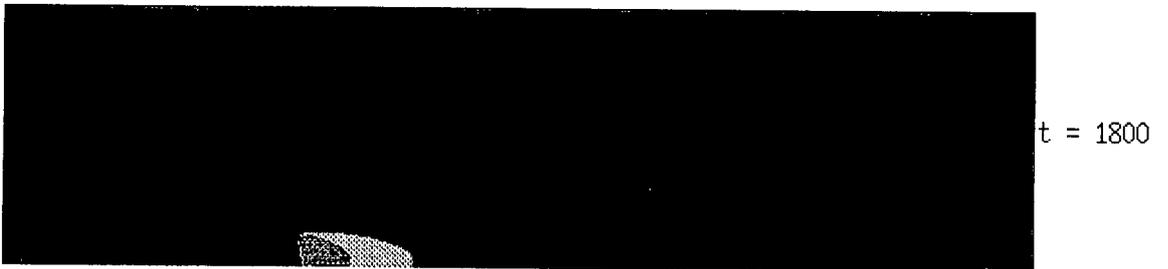
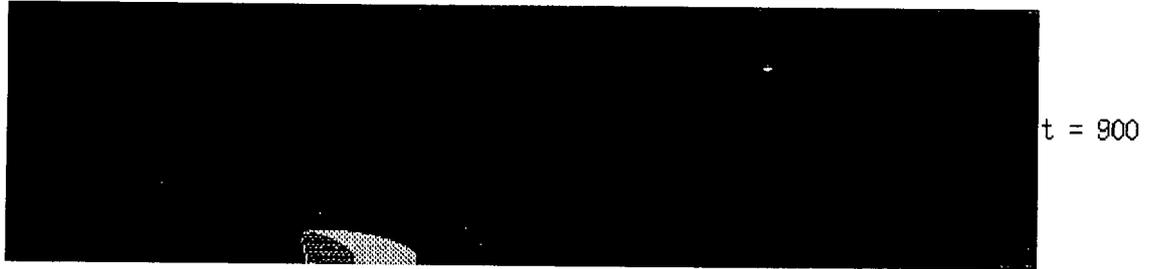


Figura 4-3: Simulación de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=0.12$ ,  $D=5$ ).

<--- v

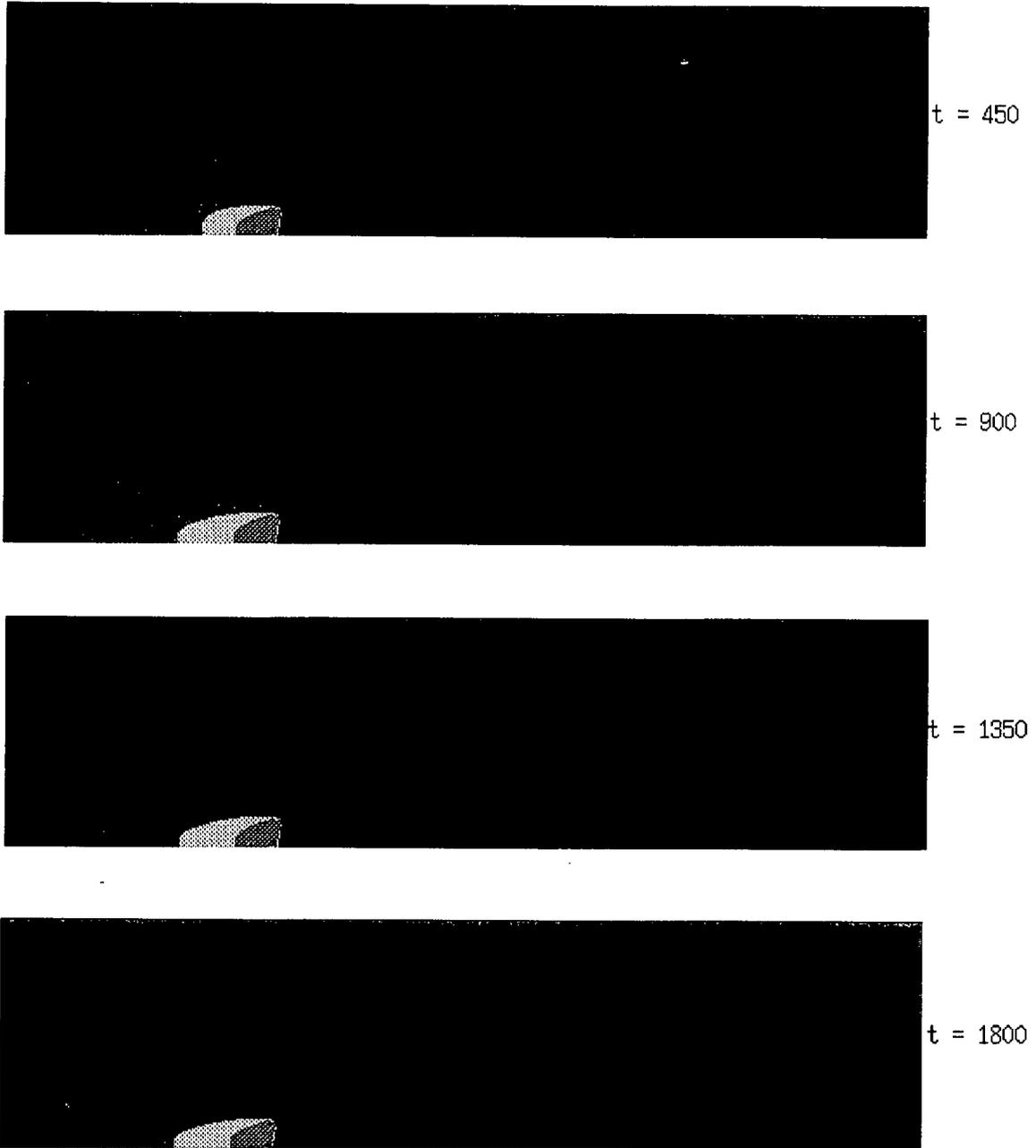


Figura 4-4: Simulación de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=-0.12$ ,  $D=5$ ).

--->  $v$

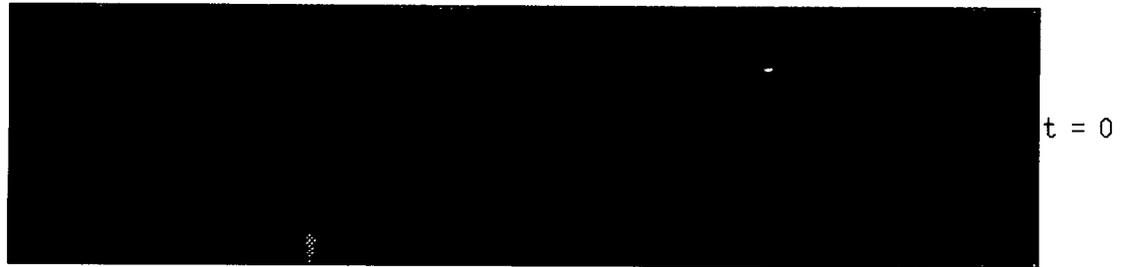


Figura 4-5: Simulación de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=0.12$ ,  $D=10$ ).

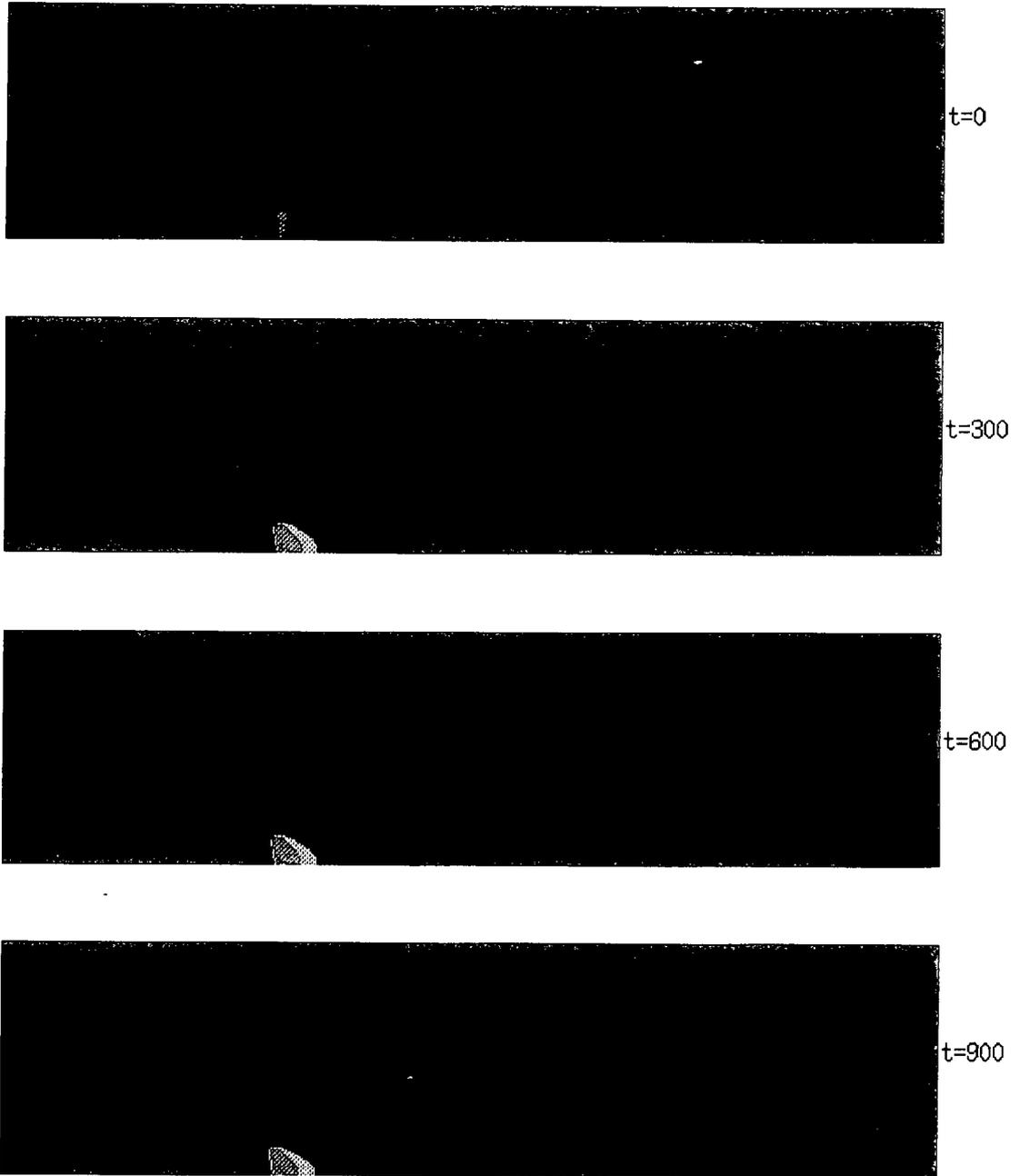


Figura 4-6(a): Simulacion de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=0.12$  (NE),  $D=5$ ).

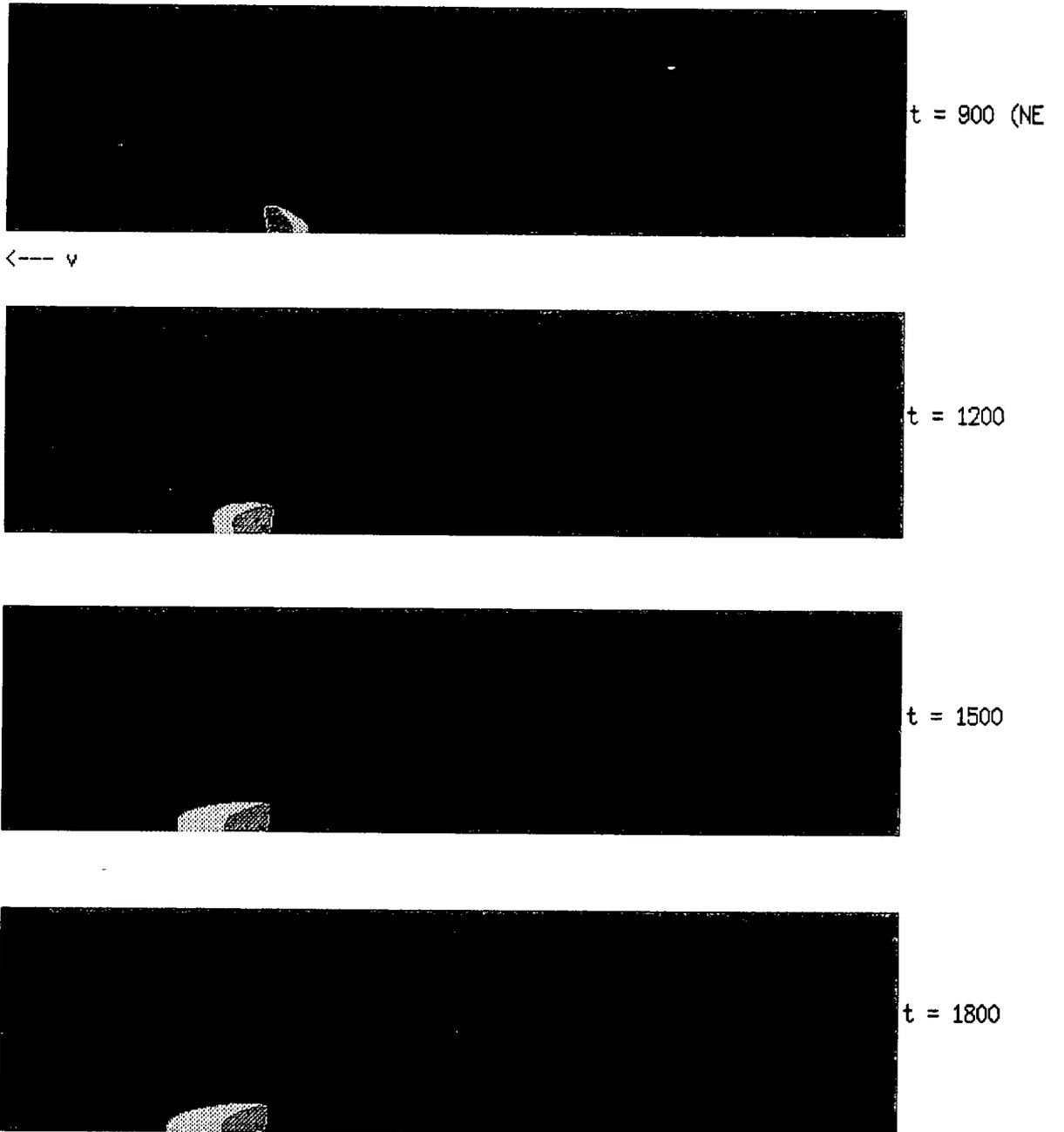
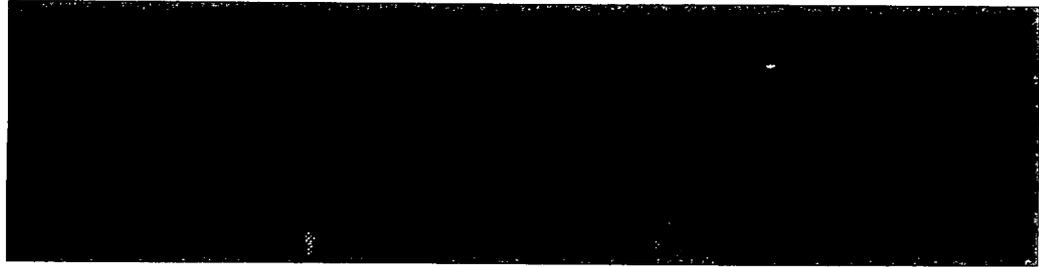
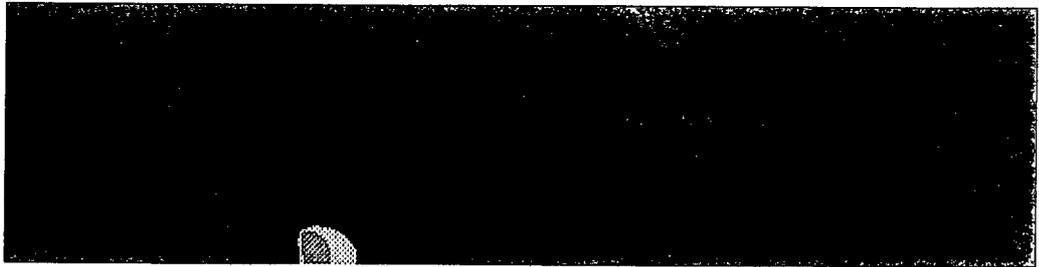


Figura 4\_6(b): Continuacion de la simulacion anterior, cambiando la direccion de  $v$ .

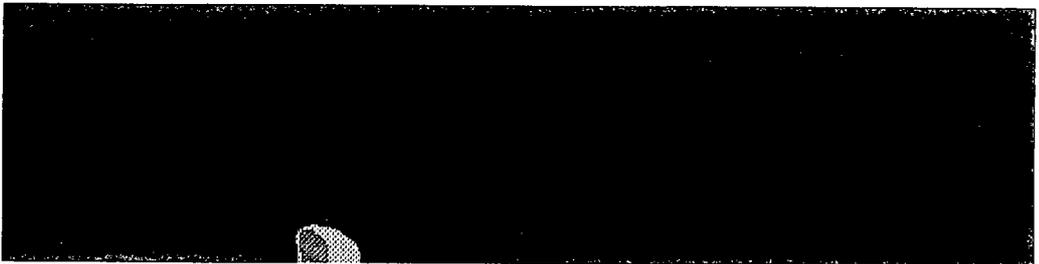
--> v



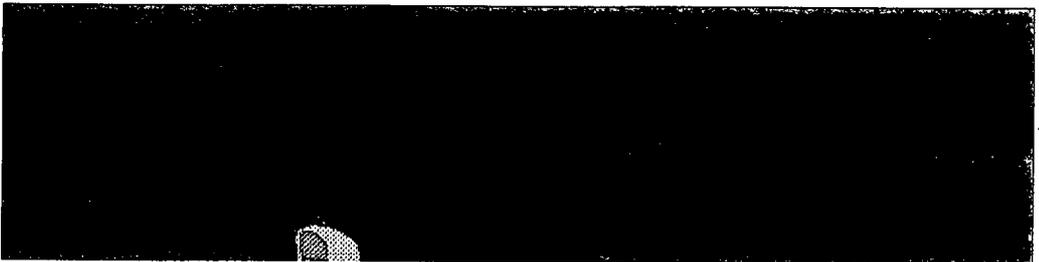
t = 0



t = 900



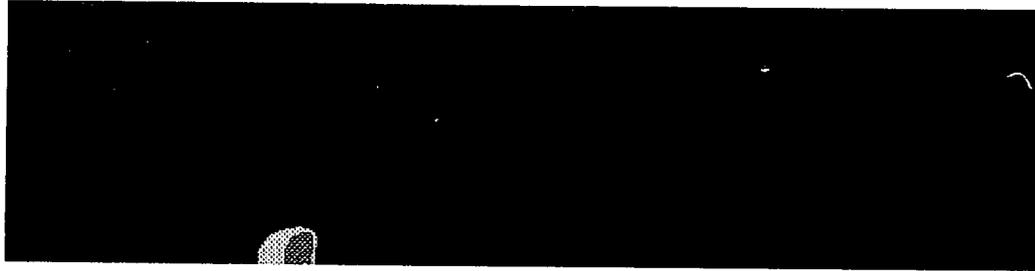
t = 1800



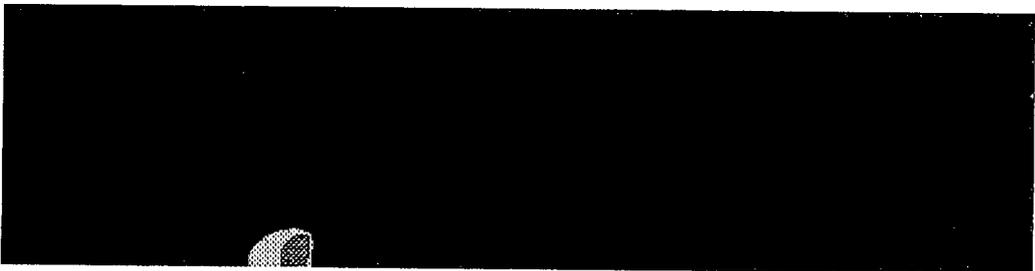
t = 3600

Figura 4-7: Simulacion de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=0.05$ ,  $D=5$ ).

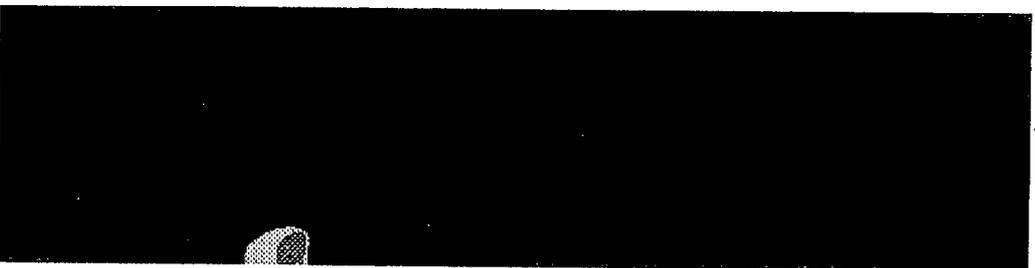
<-- v



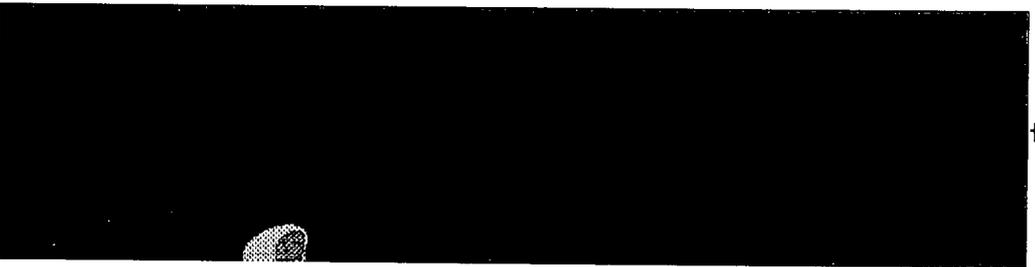
t = 900



t = 1800



t = 2700



t = 3600

Figura 4-8: Simulación de un vertido continuo mediante un ÁGR ( $\nu=-0,05$ ,  $D=5$ ).

----> v

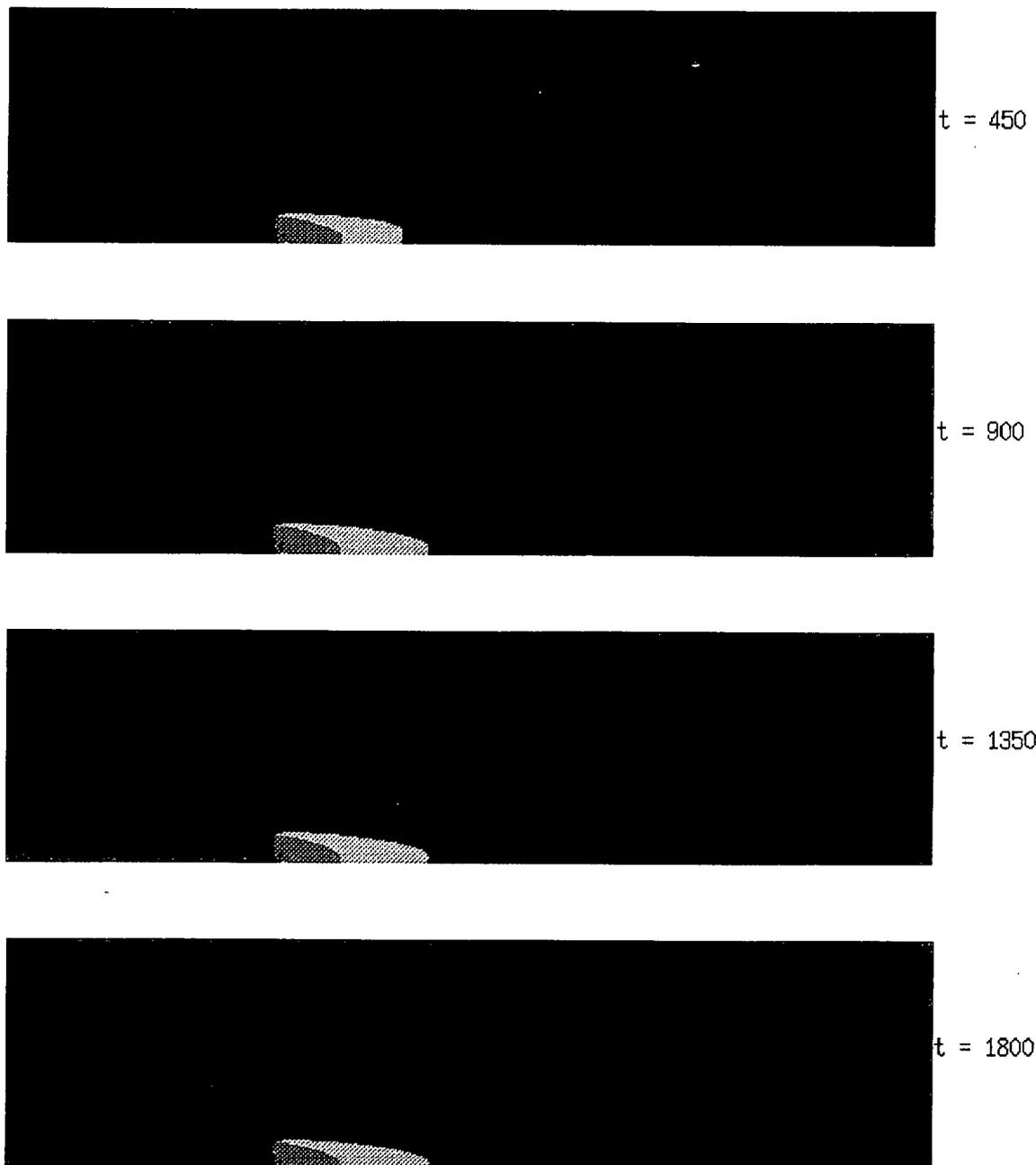


Figura 4-9: Simulacion de un vertido continuo mediante un AGR ( $\nu=0.2$ ,  $D=5$ ).

<--- v



t = 0



t = 450



t = 900

Figura 4-10: Simulacion de un vertido continuo mediante un AGR ( $v=-0.2$ ,  $D=5$ ).

### 4.3 Un método estandarizado: Cormix3

CORMIX es un programa estandarizado que, en su versión 3, realiza simulaciones para el caso de vertidos en superficie partiendo del conocimiento de los parámetros ambientales, de descarga y de legislación. Por ello, se ha elegido como modelo de comparación para calibrar cualitativamente el modelo que ha sido desarrollado. Se utiliza una descarga y condiciones ambientales idénticas a las presentadas en las simulaciones, si bien el modelo Cormix solamente permite realizar vertidos continuos y en direcciones paralelas a la costa, no permite cambiar la velocidad ambiente a lo largo de la simulación y únicamente proporciona valores de contaminación al final de la simulación, cuando alcanza la dilución deseada hasta la distancia deseada de simulación a lo largo del centro de la pluma.

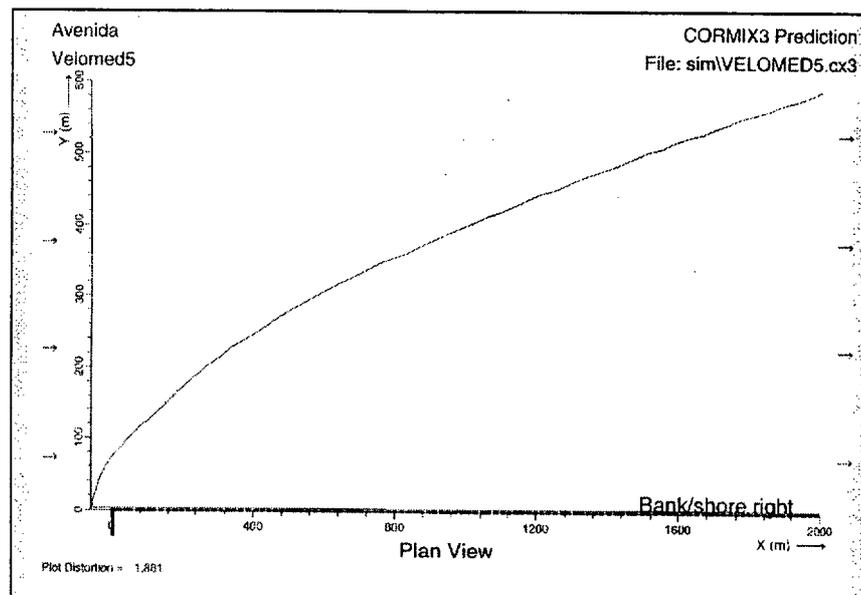


Figura 4-3: Salida de la simulación usando el programa CORMIX, donde se ve la evolución de la pluma a lo largo de la costa así como su anchura.

Además, este programa solamente proporciona los valores de contaminación en el centro de la pluma contaminante, indicando su anchura. Se presentan por lo tanto algunos resultados de las simulaciones realizadas con Cormix con el fin de comparar cualitativamente la forma y evolución del vertido considerado.

## 4.4 Comparación de resultados

Si bien existe una gran diferencia de información proporcionada por ambos modelos, se ha realizado una comparación cualitativa entre ambos modelos cuando la información obtenida era común.

Con el modelo desarrollado en este trabajo se posee en cada paso de tiempo información del número de partículas contaminantes existentes en cada nodo, con lo que se pueden obtener ficheros a lo largo de la simulación y usarlos posteriormente de entrada para otras simulaciones en las que se cambien los parámetros ambientales. Además, estos parámetros también pueden cambiarse a lo largo de una misma simulación. Por otra parte, al obtenerse valores de contaminación en todo el recinto de simulación, se puede saber en todo momento si un lugar delicado, desde un punto de vista medioambiental, puede verse afectado por una contaminación excesiva y en qué paso de tiempo ocurre.

La gráfica 4-4 muestra los valores de contaminación, dados por el número de partículas presentes en cada nodo, de las simulaciones realizadas usando CORMIX (CMX en gráfica) y el autómata de gas reticular desarrollado. Para dicha simulación (se corresponde con SIM-1 de la tabla 4.1) se ha usado una velocidad de 0.12 m/s y se ha dejado que el programa simulara 4 horas reales de evolución; además, como el programa estándar nos proporciona solamente el valor de la contaminación en el centro de la pluma y en este caso la pluma está adherida a la costa, los valores representados corresponden a los nodos situados en costa.

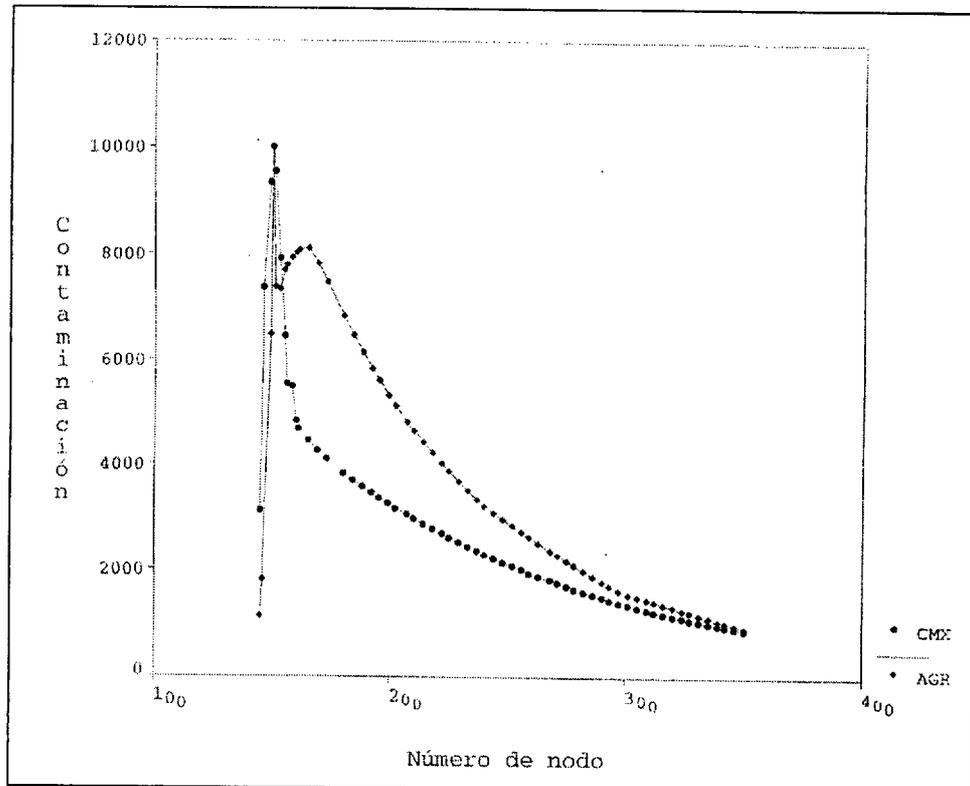


Figura 4-4: Comparación de la contaminación costera (número de partículas) obtenida por ambos métodos (CMX= Cormix, AGR= gas reticular).

Si bien el comportamiento cualitativo es similar, sin embargo se aprecia una diferencia cuantitativa en el sentido de que el modelo desarrollado produce valores más altos. Ello se debe al hecho de que hay determinadas condiciones que no pueden ser reproducidas por el programa estandar, como es el caso de la elección de las condiciones de contorno. En nuestro caso, al utilizar la condición de tipo capa límite en la frontera con la costa, se produce un efecto de acumulación contaminante costera, el cual corresponde con lo habitualmente observado en las situaciones reales.

El resto de las simulaciones muestran el mismo comportamiento aunque la comparación está muy limitada por el conocimiento de solamente una línea de nodos correspondiente al centro de la pluma (en el modelo desarrollado se

conocen en cada lugar de la pluma) en cada simulacion del programa supuestamente estandarizado y considerado como aceptable para su comparación. Ahora bien, como sus autores indican, las predicciones de salida de Cormix solamente tienen una fiabilidad del 50%, lo cual también se espera del programa desarrollado.

# Capítulo 5

## Conclusiones y futuro

### 5.1 Conclusiones

1.- Ante la necesidad evidente de nuevas formas sencillas de modelizar los problemas ambientales existentes actualmente, se ha intentado simular la evolución de un vertido de contaminante al mar mediante un método nunca anteriormente usado en este contexto.

2.- Como alternativa a las formas habituales de modelización de las ecuaciones de reacción-advección se ha realizado un modelo basado en una red de autómatas celulares, conocidos en hidrodinámica como gases reticulares.

3.- Se ha simulado la reacción, difusión y advección de un vertido realizado en la superficie del mar: a) En forma teórica dentro del marco de los autómatas de gas reticular, y b) utilizando datos oceanográficos reales como parámetros de entrada de las simulaciones.

4.- Los resultados se han comparado cualitativamente con los obtenidos mediante un programa estandarizado de evolución de vertidos al mar, en su versión para vertidos en superficie (CORMIX3). Los resultados obtenidos han demostrado el buen comportamiento del modelo realizado, si bien surgen

variaciones cuantitativas debido a las condiciones de contorno impuestas.

5.- Este tipo de modelización admite añadir fenómenos de tipo químico, físico ó biológico así como variaciones de las condiciones iniciales y de contorno de una manera no muy complicada si se trabaja en equipo y su manejo es bastante sencillo. Por ello, se muestra prometedor como herramienta en los estudios de impacto ambiental siempre que se posean ordenadores de gran potencia, por ser este método ideal para ordenadores que trabajen en paralelo.

## 5.2 Direcciones futuras

Mediante lo expuesto en la última conclusión, creo que han quedado claro la importancia que tiene este tipo de modelización cuando se dispone de un entorno informático adecuado. La tendencia actual es que los ordenadores posean una disponibilidad y capacidad de cálculo asequible al usuario medio. Por lo tanto, parece interesante seguir trabajando en este modelo para añadir variaciones como pueden ser parámetros de tipo físico, químico y biológico o condiciones reales de contorno de costa, los cuales han quedado fuera de la implementación presentada por ser ésta un primer modelo simple de aproximación de la metodología a los problemas medioambientales.

Otra posible ampliación vendría dada por el paso a tres dimensiones del modelo mediante la realización de un autómata anterior en el que se simulara la tercera dimensión espacial, cuya salida sirviera de entrada al autómata de gas reticular desarrollado.

## Referencias

- [1] Aitsam, A.M., (1968). "Turbulent diffusion of the pollutants discharged into the sea with waste waters", PhD thesis, Inst. of Oceanology, USSR Academy of Sciences, Moscow. London.
- [2] Aitsam *et al.*, (1969). Materials from the 3rd Symp. on self-purification of the water-basins and waste-water mixing. Moscow-Tallinn.
- [3] Alvarez, L., E. González and A. Trujillo (1993)." Manual de Referencia de XMEGAWAVE, Version 1.1, Análisis Matemático de Imágenes", Departamento de Informática y Sistemas, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.
- [4] Barclay, K.A. (1990). "ANSI C: problem solving and programming", Prentice Hall International Ltd., Cambridge, U.K.
- [5] Batchelor, G.K. (1967). "An Introduction to Fluid Mechanics", Cambridge University Press, Cambridge, U.K.
- [6] Bhatnagar, P.L., E.P. Gross and M. Krook (1954). *Phys. Rev.*, **94**, 511.
- [7] Bird, G.A. (1976). *Molecular Gas Dynamics*, Oxford Clarendon Press, Inglaterra.
- [8] Boon, J.P. (1995). Curso de Postgrado "Méthodes de Simulation en Mécanique Statistique", Université Libre de Bruxelles, Bélgica.

- [9] Bras, F. (1994). *Méthode de Boltzmann sur réseaux: Systèmes de réaction-diffusion et écoulement hydrodynamique*, Memoria de Licenciatura, Université Libre de Bruxelles, Belgique.
- [10] Broadwell, J.E. (1964). "Shock structure in a simply discrete velocity gas", *Phys. Fluids* **7**, 1243-1247.
- [11] Brown, R.A. (1991). *Fluid mechanics of the Atmospher*, Academic Press Inc., San Diego, USA.
- [12] Burges, C. and S. Zaleski (1987). "Buoyant mixtures of cellular automaton gases", *Complex Systems* **1**, 31-50.
- [13] Butler, R.W. (1980). "The concept of a tourist area cycle of evolution: implications for management of resources", *Canadian Geographer*, **24**, 5-12.
- [14] Chen, H. and W. H. Matthaeus (1987). "A new cellular automaton model for magnetohydrodynamics", *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1845-1848.
- [15] Chen, H., W.H. Matthaeus and L.W. Klein (1988). "An analytic theory and formulation of a local magnetohydrodynamic lattice gas model", *Phys. Fluids* **31**, 1439-1445.
- [16] Chen, S., Z. Wang, X. Shan and G.D. Doolen (1992). "Lattice Boltzmann Computational Fluid Dynamics in Three Dimensions", *J. Stat. Phys.*, **68**(3-4), 379-400.
- [17] Clavin, P., D. D'Humières, P. Lallemand and Y. Pomeau (1986). "Automates cellulaires pour les problèmes à frontières libres en hydrodynamique à deux ou trois dimensions", *C.R. Acad. Sci. Paris II* **303**, 1169-1174.

- [18] Conway, J. H., E. R. Berlekamp and R. K. Guy (1982). *Winning Ways for your Mathematical Plays*, Academic Press, New York.
- [19] Coxeter, H.S.M. (1977). *Regular Polytopes*, Dover, New York.
- [20] Dab, D. (1992). *Automates de Gaz sur Réseaux: une approche microscopique des systèmes réactifs*. Tesis Doctoral, Université Libre de Bruxelles, Bélgica.
- [21] Fischer, H.B., E.J. List, R.C.Y. Koh, J. Imberger and N.H. Brooks (1979). "Mixing in Inland and Coastal Waters", Academic Press, Inc., San Diego, USA.
- [22] Frisch, U., B. Hasslacher and Y. Pomeau (1986). "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations", *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1505-1508.
- [23] Frisch, U., D. D'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau and J.P. Rivet (1987). "Lattice gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions", *Complex Systems*, **1**, 649-707.
- [24] Frisch, U.B. (1991). "Relation between the lattice Boltzmann equation and the Navier-Stokes equations", *Physica D* **47**, 231-232.
- [25] GESAMP, (1990). "The state of the Marine Environment", Blackwell Scientific Publications, Oxford, 146 pp.
- [26] Gould, D.J. and D. Munro (1981). "Relevance of microbial mortality to outfall design", en *Coastal discharges, engineering aspects and experience*, 45-50, Thomas Telford Limited, Londres.
- [27] Grassberger, P., (1984). "Chaos and diffusion in deterministic cellular automata, *Phys. D*, **10D**:52-58; reprinted in *Cellular Automata* (D. Farmer et al., eds).

- [28] Grosfils, P. (1994). *Hydrodynamique Statistique des Gaz sur Réseau*, Tesis Doctoral, Université Libre de Bruxelles, Bélgica.
- [29] Grosfils, P., J.P. Boon, R. Brito and M.H. Ernst (1993). "Statistical dynamics in a Lattice Gas Automata, *Phys. Rev. E* **48**, No. 4, 2655-2668. (sin referenciar todavía en el texto)
- [30] Hanon, D. (1995). *Diffusion et Corrélations dans les Automates de Gaz sur Réseaux*, Memoria de Licenciatura, Université Libre de Bruxelles, Bélgica.
- [31] Hansen A. and S. Roux (1989). A Geometrical interpretation of the chaotic state of inhomogeneous deterministic cellular automata- *Physica A* **160**, 275-297; North-Holland, Amsterdam.
- [32] Hardy, J., Y. Pomeau and O. de Pazzis (1973). "Time evolution of a two-dimensional model system. I. invariant states and time correlation functions", *J. Math. Phys.* **14**, 1746-1759.
- [33] Hardy J., O. de Pazzis and Y. Pomeau (1976). "Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions", *Phys. Rev. A* **13**, 1949-1961.
- [34] Hatori, T and D. Montgomery (1987). "Transport coefficients for magnetohydrodynamic cellular automata, *Complex Systems* **1**, 735-752.
- [35] Higuera, F.J. and J. Jiménez (1989). "Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations", *Europhys. Lett.*, **9**(7), 663-668.
- [36] Higuera, F.J. and S. Succi (1989). "Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation", *Europhys. Lett.*, **8**, 517-521.

- [37] Hogeweg P. and B. Hesper (1981). Two predators and a prey in a patchy environment. An application of MICMAC modelling. *Journal Theoretical Biology* 93, 411-432.
- [38] Hogeweg P. and B. Hesper (1981). On the role of OBSERVERS in large scale systems. UKSC Conference in Computer Simulation, Wetsbury House, Harrogate, 420-425.
- [39] Hogeweg P. and B. Hesper (1985). Socioinformatic processes, a MIRROR modelling methodology. *J. Theor. Biol.* 113, 311-330.
- [40] Hogeweg P. and B. Hesper (1986). Knowledge seeking in variable structure models. *Simulation in the Artificial Intelligence Era* (Elzas, Oren & Klir, Eds.), North-Holland.
- [41] Hogeweg P. (1988). Cellular Automata as a Paradigm for Ecological Modelling. *Applied Mathematics and Computation* 27, 81-100.
- [42] Huang, K. (1963). *Statistical Mechanics*, John Willey & Sons, USA
- [43] Izrael, I. A. and A.V. Tsyban, (1983). "On the assimilation capacity of the World Ocean", *Doklady Ak. Nauk USSR*, 272, 702-705.
- [44] Kadanoff, L. and J.Swift (1968). "Transport coefficients near the critical point: a master-equation approach", *Phys. Rev.* 165, 310-322.
- [45] Koelman, J.M.V.A. (1991). "A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Navier-Stokes Fluid Flow", *Europhys. Lett.*, 15 (6), 603-607.
- [46] Koutitas, C.G. (1988). "Mathematical Models in Coastal Engineering", Pentech Press, London.
- [47] Kundu, P.K. (1990). "Fluid Mechanics", Academic Press, San Diego, USA.

- [48] Mareschal, M. (1995). Curso de postgrado "Physique Statistique Computationnelle", Université Libre de Bruxelles, Bélgica.
- [49] Martínez Marrero, A. (1995). "Estudio Sobre la Propagación de Ondas de Marea en Canales: Aplicación al Análisis de Niveles y Corrientes en la Plataforma de Gran Canaria". Tesis de Doctorado, Dpto. de Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.
- [50] McQuarrie, D.A. (1976). *Statistical Mechanics*, Harper & Row, New York.
- [51] Meyer-Arendt, K.J. (1993). "Geomorphic impacts of resort evolution along the Gulf of Mexico coast: applicability of resort cycle models", en *Tourism vs Environment: The Case for Coastal Areas*, editado por P.P. Wong, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.
- [52] Murray, J. (1988). *Mathematical Biology*, Springer Verlag.
- [53] Nannelli, F. and S. Succi (1992). "The Lattice Boltzmann Equation on Irregular lattices", *J. Stat. Phys.*, **68**(3-4), 401-407.
- [54] Noullez, A. (1990). *Automates de gaz sur réseaux: Aspects théoriques et simulations*, Tesis doctoral, Université Libre de Bruxelles, Bélgica.
- [55] Oono Y. and M. Kohmoto (1985). Discrete model of chemical turbulence. *Phys. Rev. Lett.* **55**(27), 2927-2930.
- [56] Ozmidov, R.V. (1990). "Diffusion of contaminants in the Ocean", *Oceanographic Sciences Library*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands.
- [57] Pacheco, J.M., I. Fernández and M.G. Villagarcía (1990). "On some open problems in the modelling of coastal systems". En R. Quélenec *et al.* (eds): *Actes de Symposium LITTORAL 1990*, pp. 167-171.

- [58] Packard N.H. and S. Wolfram (1985). Two-Dimensional Cellular Automata. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 38, 901-946.
- [59] Portmann, J.E. and A. Preston (1981). "Sources and assessment of pollution". En **Coastal discharges:engineering aspects and experience**, publicado por Thomas Telford Limited, London, pp. 39-50.
- [60] Qian, Y.H., D. D'Humières and P. Lallemand (1992). "Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation", *Europhys. Lett.*, **17** (6), 479-484.
- [61] Qian, Y.H. and S.A. Orszag (1993). "Lattice BGK Models for the Navier-Stokes Equation: Nonlinear Deviation in Compressible Regimes", *Europhys. Lett.*, **21** (3), 255-259.
- [62] Rothman, D.H. and S. Zaleski (1994). "Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions and multiphase flow", *Rev. Mod. Phys.*, Vol. **66**, No. 4, 1417-1479.
- [63] Stanley, H.E. (1971). *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Dover, New York.
- [64] Succi, S., R. Benzi and F. Higuera (1991). "The lattice Boltzmann equation: A new tool for computational fluid-dynamics", *Physica D* **47**, 219-230.
- [65] Smith III, A.R., (1984). "Plants, fractals and formal languages", *Comp. Graphics* **18**(3): 1-10
- [66] Toffoli, T and N. Margolus (1987). *Cellular Automata machines: A new environment for modeling*, MIT Press Series in scientific Computation, Cambridge, USA..

- [67] Ulam, S. (1970). "Some mathematical problems connected with patterns of growth figures", en *Essays on Cellular Automata*, A.W. Burks (ed.), Univ. of Illinois Press.
- [68] Vichniac G.Y. (1984). Simulating physics with cellular automata. *Phys. D 10D*, 96-116; reprinted in *Cellular Automata* (D. Farmer et al., Eds.).
- [69] Von Neumann, J. (1966). "Theory of self-reproducing automata", Univ. of Illinois Press, Urbana, USA.
- [70] Weimar, J.R. (1994). "Discretized Lattice Boltzmann Method for Athermal Hydrodynamics", *Publicación Interna*, Université Libre de Bruxelles, Belgique.
- [71] Weimar, J.R. (1995). *Cellular Automata for Reactive Systems*, Tesis Doctoral, Université Libre de Bruxelles, Belgique.
- [72] Weisbuch, G., (1991). *Complex Systems Dynamics*, Lecture Notes in the Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity, Vol II, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, 189 pp.
- [73] Wolfe, R.I. (1983). "Recreational travel: the new migration, revised", *Ontario Geography* **19**, 103-124.
- [74] Wolfram, S. (1984). Universality and complexity in cellular automata. *Physica 10D*, 1-35, North-Holland, Amsterdam.
- [75] Wolfram S., (1986). *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific.
- [76] Wolfram, S. (1986). "Cellular Automaton Fluids 1: Basic Theory", *J. Stat. Phys.*, **45**, 471-526.

- [77] Wolfram, S. (1986). "Random sequence generation by cellular automata", *Adv. Appl. Math.*,7:123.
- [78] Wolfram, S. (1988). "Cellular Automaton Supercomputing", *High-Speed Computing: Scientific Applications and Algorithm Design*, ed. R.B. Wilhelmson, Univ. of Illinois Press,40-48, reprinted in Wolfram book of Collected Papers(1994), 499-509.
- [79] Wrobel, L.C. and C.A. Brebbia (eds), (1993). "Modeling, Measuring and Prediction", Water Pollution II, Proceedings of the 2nd International Conference on Water Pollution, Computational Mechanics Publications, Southampton, U.K.