

# INESTABILIDADES Y DIFUSION EN SISTEMAS DESORDENADOS

## INSTABILITIES AND DIFFUSION IN DISORDERED SYSTEMS

D. Müller, A. D'Onofrio, and M. Cachile\*

Grupo de Medios Porosos - Facultad de Ingeniería-  
Universidad Nacional de Buenos Aires - CONICET  
Paseo Colón 850 - (1063) -Buenos Aires - Argentina

e-mail: [mcachil@fi.uba.ar](mailto:mcachil@fi.uba.ar)

Se presentan los resultados del estudio numérico llevado a cabo sobre la difusión de dos especies en geometrías confinadas: celdas de Hele-Shaw y medios porosos bidimensionales. Las simulaciones se realizaron utilizando un esquema de Lattice-gas basado en el modelo **FHP-III** modificado para trabajar con dos especies con propiedades distintas, pero indistinguibles para las colisiones. Los medios porosos se simularon con obstáculos circulares distribuidos al azar. Se implementó una fuerza constante diferenciada para cada especie que, para cierta combinación de parámetros, provoca la aparición de inestabilidades. Se caracterizó de manera cualitativa la influencia que tiene la presencia de los medios porosos sobre las evoluciones tanto en presencia como en ausencia de una fuerza.

Palabras Claves: Lattice-gas, medios porosos, inestabilidades

Results of the numerical study developed on two species in confined geometries: Hele Shaw cells and porous media are presented. The simulations were performed using a lattice-gas scheme, based on the FHP-III model modified in order to allow the existence of two different species of particles, but equivalent in the collisions. The porous media were simulated with random-distributed circular obstacle. A constant force for each species was implemented and for certain parameter values, induces the onset of instabilities. The influence of the porous media on the fluid evolution with and without force was qualitatively characterized.

Key Words: Lattice-gas, porous media, instabilities.

### I. INTRODUCCIÓN

Usualmente, la resolución numérica del movimiento de un fluido, se basa en discretizar las ecuaciones relevantes de diversas maneras (elementos finitos, técnicas espectrales, etc.). Los métodos de redes, de los cuales el lattice-gas forma parte, tiene una aproximación diferente: la idea es utilizar partículas que se mueven sobre una red discreta y que pueden tener una cantidad pequeña de velocidades posibles, dadas por la geometría de la red. Si bien a escala microscópica (escala de la red) la simplificación es sumamente grande, a escala macroscópica el sistema simula correctamente un fluido, puesto que, bajo ciertas condiciones, este método resuelve la ecuación de Navier-Stokes incompresible. En ausencia de fuerzas, puede resolver la ecuación de difusión<sup>1</sup>.

La ventaja de este método reside en que no es necesario conocer las ecuaciones macroscópicas que controlan el fenómeno, puesto que solo se controlan las interacciones básicas entre las partículas. Simultáneamente, con este método, es relativamente fácil trabajar con contornos complicados pues se definen de manera simple, lo que facilita la inclusión de

medios porosos dentro de la región de estudio y de contornos rígidos<sup>2</sup>.

El método de Lattice Gas puede ser aplicado tanto a configuraciones de dos fluidos miscibles como inmiscibles, con diferentes densidades, ubicados en un campo de fuerzas, por ejemplo gravitatorio, eléctrico, etc. Para el caso en que se trata de un campo gravitatorio, si el gradiente de densidades a través de la frontera de separación de ambos fluidos es opuesto a la gravedad, se originarán inestabilidades por diferencia de densidad<sup>3,4</sup>. Este sistema puede ser adecuadamente simulado por el método de Lattice-Gas aplicando fuerzas diferentes a cada especie involucrada.

Este esquema no es solamente aplicable a la diferencia de densidad, puede ser utilizado para cualquier situación donde cada especie esté sujeta a distintas fuerzas.

En trabajos anteriores, usualmente los medios porosos utilizados en este tipo de simulaciones estaban formados por obstáculos puntuales, llamados centros dispersores<sup>5</sup>. Este tipo de obstáculos reproduce adecuadamente el efecto que tienen los medios porosos sobre el flujo, pero no las características usuales de los medios porosos, tales como porosidad o permeabilidad.

\* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

El presente trabajo tiene por objetivo analizar la influencia que tienen los medios porosos sobre la difusión entre dos especies y sobre la aparición y características de las inestabilidades. Se analizó la influencia que tienen el tamaño y la concentración de los obstáculos que forman los medios porosos y la concentración de partículas. Adicionalmente, se estudió cuáles son los parámetros relevantes que caracterizan los medios porosos simulados y su influencia relativa.

## II. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO

Se implementó una modificación del modelo FHP-III<sup>2</sup>, de 7 velocidades para trabajar con dos especies de partículas.

Para cada nodo (i,j) y cada especie, se define un número binario de 7 bits,  $C^b(i, j)$ , que tiene una correspondencia unívoca con cada configuración de las velocidades, lo mismo que su representación decimal,  $C^d(i, j)$ . Este hecho permite que las reglas de colisión puedan ser escritas en una matriz de 256 filas (cantidad total de configuraciones) y 14 columnas, que son los dos posibles resultados de la colisión de 7 bits, cada uno con probabilidad 1/2.

Las partículas de ambas especies son idénticas, salvo cuando se introduce una fuerza constante, en cuyo caso solo se aplica sobre una de las especies, en la dirección +x (hacia la derecha en las imágenes).

En las colisiones se conserva la cantidad de movimiento y el número de partículas de cada especie, que se distribuyen de manera aleatoria e independiente de la distribución antes de la colisión. Este tratamiento determina que ambas especies se comporten como miscibles.

### Condiciones de contorno e iniciales

Sobre los contornos rígidos que forman las paredes exteriores, así como los que forman los medios porosos, se utilizaron colisiones viscosas, es decir, cuando una partícula incide sobre un obstáculo, su velocidad se invierte. De esta manera, en las cercanías de los contornos sólidos, la velocidad media es nula.

Se trabajó con dos tipos de celdas: celdas cerradas, donde los cuatro contornos están formados por paredes rígidas y celdas periódicas. Estas últimas tienen las dos paredes perpendiculares a la fuerza rígidas y las restantes tienen condiciones periódicas. Las partículas que alcanzan estas paredes, son reinyectadas en la opuesta, con idéntica velocidad.

Las condiciones iniciales que se utilizaron para todas las experiencias fueron similares: una especie en cada mitad de la celda con velocidades al azar en cada nodo.

La concentración de partículas se controló fijando la fracción promedio de llenado, donde el valor 1 equivale a 7 partículas por nodo. La distribución inicial de velocidades para cada nodo, es al azar. Se investigaron numéricamente concentraciones desde 0.15 hasta 0.99.

## Obstáculos interiores

Se realizaron dos tipos de simulaciones: celdas de Hele-Shaw (sin obstáculos) y medios porosos.

Los obstáculos interiores, que forman los medios porosos fueron obtenidos con distribuciones al azar de círculos de radio constante ( $r$ ), con la condición de que la distancia mínima entre cualquier par de centros sea  $3r$ . Se utilizaron círculos de radio 2 y 10 unidades de red y distribuciones de entre 700 y 3000 círculos por  $10^6$  nodos.

## Fuerza constante

Se implementó el método utilizado por Kadanoff<sup>6</sup> donde las partículas, luego de colisionar, son reorientadas. Los únicos cambios de velocidad posibles son aquellos paralelos a la dirección de la fuerza (para nuestro caso en +x), con probabilidad  $u_f$ . El valor de este umbral es el que controla la intensidad de la fuerza. Se estudiaron valores de  $u_f$  entre  $10^{-4}$  y  $10^{-2}$ .

Esta fuerza se aplica solamente a las partículas que están inicialmente a la izquierda, con sentido hacia la derecha, de forma tal que faciliten la aparición de inestabilidades

## III. RESULTADOS – DIFUSION

La ecuación que gobierna el sistema, en ausencia de fuerzas exteriores es la ecuación de convección - difusión:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \bar{u} \cdot \bar{\nabla} c(x,t) = D \nabla^2 c(x,t) \quad (1)$$

Donde  $C$  es la concentración inicial,  $x$  y  $t$  son la posición y el tiempo y  $D$  es el coeficiente de difusión y  $u$  es la velocidad local<sup>7</sup>.

La solución de la ecuación de difusión cuya condición inicial es un escalón, en toda la recta está dada por la función<sup>8</sup>:

$$c(x,t) = \frac{c_0}{2} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right) \quad (2)$$

Donde  $c_0$  es la concentración inicial. La función (2)

Se obtuvo  $\sqrt{Dt}$  ajustando los perfiles de concentración de cada especie, promediadas por columna, con la función (2) en función del tiempo (ver figura 1 a). Luego, de  $\sqrt{Dt}$  vs  $t$  (figura 1b), se obtuvo el valor de  $D$  para esa experiencia.

Cuando sea necesario y tal como suele usarse en el estudio de líquidos miscibles [7,10], se tomará como *interfase*, al punto de concentración intermedia entre ambas especies, que es el punto a mitad de altura de la figura 1 b).

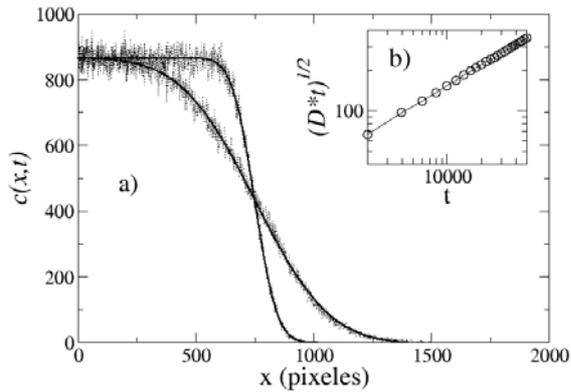


Figura 1. a) Dos instantes en la evolución típica de la concentración, junto con sus ajustes con la ecuación (2). Con los parámetros ajustados se grafica b) para obtener  $D$ .

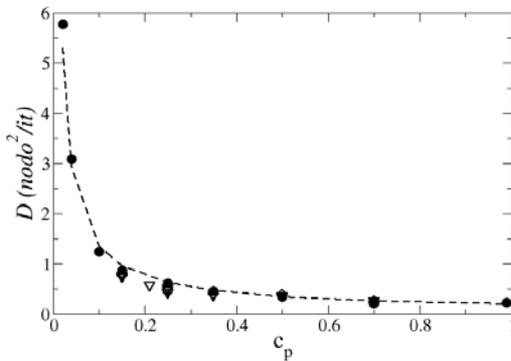


Figura 2. Coeficiente de difusión en función de la concentración de partículas ( $c_p$ ) para celda de Hele-Shaw (símbolos vacíos) y con medios porosos (símbolos llenos). La línea punteada es el ajuste con  $1/c_p$ .

Las simulaciones fueron realizadas en regiones rectangulares (matrices) de distintos tamaños, desde 500x500 nodos hasta 4000 x 1200.

Se hicieron corridas en matrices de 1000x2000 variando la concentración desde 0.15 hasta 0.99.

Con el objeto de verificar que la presencia de obstáculos no modifica sustancialmente el valor del coeficiente de difusión, se emplearon medios porosos con distintos radios (entre 1 y 10), cantidad de obstáculos (entre 700 y 3000 círculos por  $10^6$  nodos) y concentraciones de partículas entre 0.15 y 0.99.

En la figura 2 se muestran los resultados obtenidos en ambas condiciones.

#### IV. RESULTADOS – INESTABILIDADES

Se realizaron simulaciones utilizando las mismas condiciones anteriores, pero en presencia de una fuerza como la presentada en la sección II, que se aplica solo a las partículas ubicadas inicialmente a la izquierda. Se variaron el radio de los obstáculos, su concentración y el parámetro de fuerza.

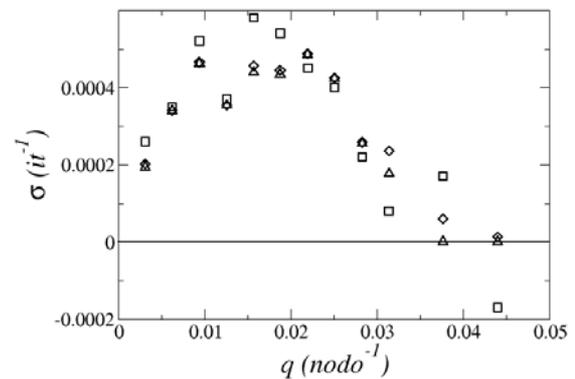


Figura 3. Curva de dispersión para celda de Hele-Shaw. Los diferentes símbolos representan distintas corridas variando la semilla random inicial del código.

Se realizó un estudio de Fourier a tiempos cortos de la interfase entre las dos especies con el objeto de analizar el crecimiento de cada número de onda. Este estudio mostró que existe un rango de números de onda para las cuales las inestabilidades crecen y, en su zona central, el crecimiento es más rápido, según se muestra en la figura 3. Los números de onda mayores no se tuvieron en cuenta en el análisis dado que su contribución es despreciable frente a la de los mostrados.

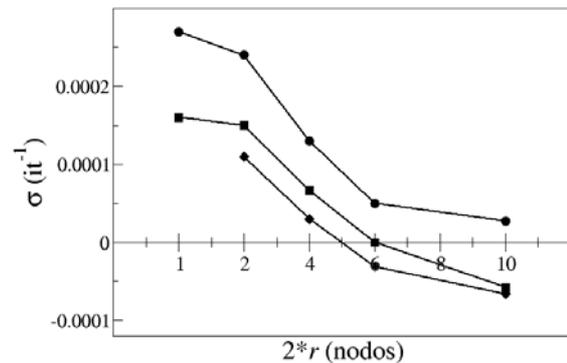


Figura 4. Dependencia de la tasa de crecimiento de la inestabilidad en función del diámetro de los obstáculos, cuya cantidad se mantiene constante en 1500 círculos /  $10^6$  nodos. Parámetro de fuerza: de arriba abajo: 8, 4 y  $2 \times 10^{-4}$ , número de onda  $q = 0.03 \text{ nodo}^{-1}$ .

En la figura 4 se muestra el comportamiento de la tasa de crecimiento (en 1/iteración) al variar la fuerza aplicada y el diámetro de los obstáculos, manteniendo su número fijo en 1500 círculos /  $10^6$  nodos.

En las figuras 5 y 6 se muestran ejemplos de la inestabilidad para distintas configuraciones, con y sin medios porosos.

#### V ANALISIS Y DISCUSION

Los ensayos con círculos de radio mayor que 10 unidades de red, mostraron que la dispersión que producen en la interfase es tan importante que hace desaparecer las inestabilidades aun para

concentraciones pequeñas de obstáculos. Por esta razón, el estudio se limitó a círculos de radio menor que 10 unidades de red.

En las experiencias de difusión, se encontró que el coeficiente de difusión es inversamente proporcional a la concentración  $cp$ , coherente con lo que sucede en sistemas gaseosos<sup>9</sup>, en un intervalo apreciable de concentraciones, como se muestra en la figura 2.

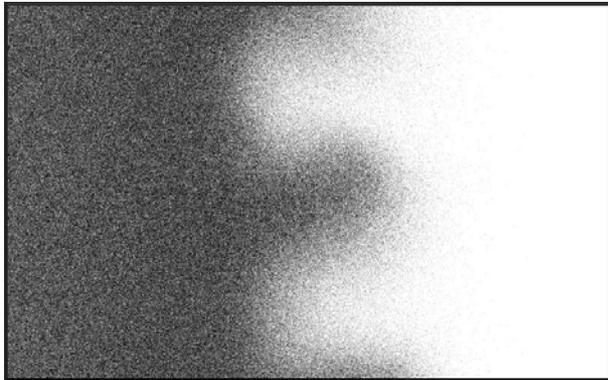


Figura 5: Imagen de una evolución inestable, 10.000 iteraciones, sin medio poroso, concentración 0.7, parámetro de fuerza:  $8 \times 10^{-4}$ . Por claridad solo se muestra una de las especies.

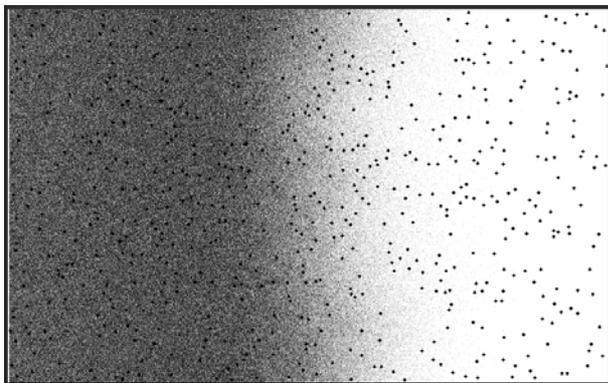


Figura 6. Idénticas condiciones que en la figura 5, pero con un medio poroso de 1500 círculos /  $10^6$  nodos.

En ausencia de fuerzas, se encontró que la concentración de partículas de cada especie, promediada por columnas responde satisfactoriamente a la solución de la ecuación de difusión, ecuación (2) tanto en función de la posición para un tiempo dado así como su variación con el tiempo. En la figura 1 se aprecia el buen acuerdo entre los datos y la predicción de dicha ecuación.

Se encontró que el coeficiente de difusión no varía apreciablemente (menos del 20%) con la introducción de medios porosos, lo que permite independizar éste de la inclusión de obstáculos en el interior.

La relación de dispersión de la inestabilidad a tiempos cortos, es similar a la encontrada en problemas

donde existe una longitud de onda preferencial, como por ejemplo Rayleigh-Taylor<sup>3,4</sup>. Esto muestra que el modelo utilizado reproduce las características esenciales de este tipo de inestabilidades, tanto en celdas de Hele-Shaw como en medios porosos. En la figura 5 se observa una longitud de onda predominante de  $\sim 250$  nodos, que corresponde a un número de onda de  $0.025 \text{ nodos}^{-1}$ , cercano a los valores máximos de la figura 3.

Con la introducción de medios porosos, las inestabilidades se ven disminuidas, tal como se observa en experiencias similares<sup>10</sup>. Si bien este estudio no está completo, esta tendencia es la correcta para estos sistemas. Los resultados de este estudio mostraron que a) las inestabilidades crecen más lentamente cuando se mantiene la cantidad de obstáculos y se aumenta su radio. b) cuando se mantiene la cantidad de obstáculos y se aumenta el diámetro y c) se disminuye el parámetro de fuerza. Este comportamiento puede verse claramente en la figura 4, donde se grafica la tasa de crecimiento en función del diámetro de los obstáculos.

Este estudio, de carácter preliminar muestra que el método de Lattice-Gas con dos especies, es adecuado para el estudio del flujo en medios porosos cuando los parámetros importantes están relacionados con las características de los mismos.

Como perspectiva interesante, resta cuantificar el efecto relativo de los parámetros de los medios porosos y obtener su permeabilidad y porosidad equivalentes.

## Referencias

- 1 - D. Rothman, S. Zaleski, Lattice Gas automata: simple models of complex hydrodynamics, Cambridge University Press, 1997.
- 2 - J. P. Rivet, J. P. Boon; *Lattice gas hydrodynamics*, Cambridge University Press, UK, 2001.
- 3 - S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Clarendon, Oxford, 1961.
- 4 - Stability of miscible displacements in porous media with non-monotonic viscosity profiles, O. Manickam and G. M. Homsy; *J. Fluid Mech.*, 288, 75-102 (1995).
- 5 - Calculation of the permeability of porous media using hydrodynamic cellular automata; G. A. Kohring, *J. Stat Phys.*, 63, 411-418, 1991. The cellular automata approach to simulating fluid flows in porous media, G. A. Kohring, *Physica A*, 186, 97-108, 1992.
- 6 - A Poiseuille viscometer for the lattice-gas automata; L. Kadanoff; G. McNamara, G. Zanetti, *Complex Systems I*, 791-803, 1987.
- 7 - J. Yang, A. D'Onofrio, S. Kalliadasis and A. Wit, *J. Chem. Phys.* 117, 20 (2002) y sus referencias.
- 8 - W. Jost; *Diffusion in Solids, Liquids, Gases*, Academic Press, 3<sup>rd</sup> Ed., NY, 1960.
- 9 - R. Feynman, *Feynman Lectures on Physics*, Fondo Educativo Interamericano, Panamá, 1971.
- 10 - Fingering instabilities in vertical miscible displacement flows in porous media, O. Manickam, G. Homsy *J. Fluid Mech.*, 288, 75-102, 1995.