

Implementación de un modelo de autómatas celulares para simular transporte de solutos a través de un medio poroso

Implementation of a cellular automata model to simulate the transport of solutes through a porous medium

(Recepción 31/12/2016; Aceptación 24/04/2017)

Lora Ariza, B.J.¹; Bayuelo Sierra, A.J.²; Lora Castro, B.J.³; Donado Garzón, L.D.⁴

¹Universidad Nacional de Colombia, Av NQS # 45 -03 LEH (408-207) Bogotá.

²Universidad Nacional de Colombia, Av NQS # 45 -03 LEH (408-207) Bogotá

³Universidad del Atlántico, Km 7 vía al Puerto Colombia. Bloque C of 601 Barranquilla.

⁴Universidad Nacional de Colombia, Av NQS # 45 -03 Lab Hidráulica (409-310) Bogotá.

Teléfono: +57 3005642813.

Email: bjlora@unal.edu.co

Resumen El transporte de solutos conservativo a través de un medio poroso, ha sido ampliamente estudiado a partir de la ecuación de Advección Dispersión (ADE) la cual se soluciona generalmente mediante los métodos numéricos tradicionales (elementos finitos, diferencias finitas, volúmenes finitos). En el presente artículo se propone un modelo estocástico 2-dimensional de autómatas celulares por medio del cual es posible simular el transporte de solutos a través de un medio poroso.

Palabras clave. Autómatas celulares, Transporte de solutos, medio poroso.

Abstract. The transport of conservative solutes through a porous medium has been extensively studied using the Equation of Advection Dispersion (ADE) usually solved by traditional numerical methods (finite differences, finite elements, and finite volumes). In this paper a 2-dimensional stochastic cellular automata model which allows to simulate the transport of contaminants through a porous medium is proposed.

Keywords. Cellular automata model, transport of solutes, porous medium.

1. Introducción

Las autómatas celulares (CA) fueron inventadas a finales de la década del 40 por Von Neumann y Ulam (Von Neumann, 1948). Estas fueron definidas como una colección de celdas (autómata individual) en una retícula en forma específica que evolucionan a través de un número de pasos discretos de acuerdo con un conjunto finito de reglas que se basan en las celdas vecinas (Zenil, 2009). De aquí que, un autómata celular está conformado por una estructura reticular, un conjunto de valores (estados) y una serie de reglas que describen cómo evolucionan los estados de una vecindad.

El transporte de solutos conservativo a través de un medio poroso, ha sido ampliamente estudiado. Sin embargo, tanto los procesos físicos como los químicos inherentes al transporte de solutos, han sido abordados principalmente considerando la ecuación diferencial de Advección-Dispersión (ADE), generalmente mediante métodos numéricos tales como Elementos Finitos, Diferencias Finitas y Volúmenes Finitos, incurriendo en algunos casos a errores numéricos (difusión numérica, entre otros).

Por ello, en el presente artículo se propone un modelo de autómatas celulares (CAM), que permita simular el transporte de solutos a través de un medio poroso homogéneo y uno heterogéneo estratificado (dos estratos) cualitativamente, es decir que mediante una

variable booleana se indica si hay o no presencia del soluto en el pixel analizado. Por ello, el modelo propuesto, no permite determinar cuantitativamente la dispersión hidrodinámica del soluto transportado, pero sí describir su comportamiento hidrodinámico.

Cabe resaltar que el modelo fue construido mediante un código computacional empleando el lenguaje de programación C++ y el facilitador IDE NetBeans.

2. Tipo de Autómata celular

Los autómatas celulares suelen clasificarse de acuerdo a la estructura que poseen: según la dimensión, el tipo de vecindad, el comportamiento cualitativo de la evolución y sus reglas de transición. En este caso se consideró un espacio bidimensional el cual simula un corte longitudinal de un acuífero y una vecindad cuadrada de 5 x 5 píxeles.

En cuanto al comportamiento cualitativo de la evolución, los CA pueden ser clasificados según (Wolfram, 1983) en cuatro clases: (I) todos los estados iniciales convergen uniformemente a un estado final, (II) los estados iniciales convergen a varios estados finales siguiendo un conjunto limitado de estructuras simples que permanecen constantes a lo largo del tiempo o se repiten periódicamente (III) los estados iniciales cumplen un comportamiento similar al de la clase II con la diferencia que los patrones de repetición no son fácilmente identificables, por último en la clase (IV) se



presentan patrones que implica una mezcla de orden y aleatoriedad (Huerta Trujillo, 2009). Sin embargo, es posible desarrollar modelos de autómatas celulares que presenten reglas de transición no contenidas en esta clasificación (Juarez, 2000).

El modelo propuesto considera reglas de transición estocásticas generadas a partir del entrenamiento del modelo físico bidimensional (Sand box) el cual representa un acuífero confinado (homogéneo o heterogéneo estratificado), asemejándose a la clase IV propuesta por Wolfram (Wolfram, 1983).

La formulación algorítmica del modelo CA propuesto es presentado mediante el pseudocódigo presentado en la Fig. 1.

```

función ActualizarReticula(int sandbox[ ][ ], diccionario reglas,
                             int n, int m)
devuelve int[ ][ ]
entradas: sandbox, matriz de int de n, m donde sandbox[i][j]
           ∈ {0,1,2}, 0 ≤ i, j < n
           reglas, diccionario que relaciona estados con transición
           n, entero que representa el número de filas de sandbox
           m, entero que representa el número de columnas de sandbox
salida: matriz que representa la retícula actualizada
estáticas: resultado, matriz de n, n donde resultado[i][j] ∈ {0,1,2},
           0 ≤ i, j < n
Para cada i en 0 → n - 1 hacer
  Para cada j en 0 → m - 1 hacer
    estado ← vecindario(sandbox[i][j])
    α ← aleatorio(0,1)
    resultado[i][j] = escoger(reglas, estado, α)
  fin para
fin para
devolver resultado
    
```

Figura 1. Formalización algorítmica del método CA.

Este algoritmo corresponde al sustento conceptual del paradigma de los autómatas celulares. En él, es presentada una función *ActualizarReticula* la cual tiene como entrada una matriz [*i*][*j*] en el instante *t*, que corresponde al tamaño del sandbox entendido como una gran matriz en la que los elementos de la misma pertenecen al conjunto de enteros [1,3], donde 1 corresponde a una arena fina sin trazador, 2 una arena gruesa sin trazador y 3 la presencia de trazador. Se recorre el sandbox (matriz), y seleccionando probabilísticamente una regla de transición, se genera un nuevo estado para el sandbox en el instante *t*+1.

3. Adquisición de datos

Una de las dificultades en el estudio del comportamiento de procesos hidrogeológicos radica en la imposibilidad de la observación directa de los fenómenos que ocurren bajo tierra. Por ello, uno de los mecanismos experimentales utilizados en la actualidad son los modelos físicos bi-dimensional conocidos como Sand Boxes. Ellos son fabricados en materiales transparentes los cuales permiten la visualización de los procesos de transporte que ellos acaecen. Para esta investigación se construyó uno fabricado en acrílico (Fig. 2).

En él, se realizó un ensayo de trazador en un acuífero confinado con una inyección continua de Eosina Amarillenta Tipo Y. Durante éste, se tomaron fotografías digitales de alta resolución (18 Megapíxeles) cada minuto, las cuales fueron procesadas eliminando el ruido producido por efectos ópticos externos.

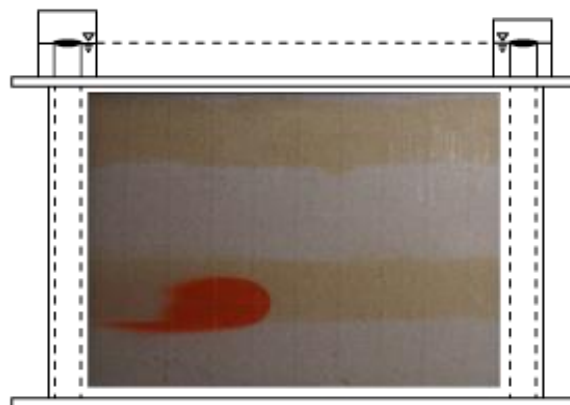


Figura 2. Esquema del Sandbox empleado (Elaborado por el autor).

En el CA propuesto se consideraron tres (3) clases, la primera representa al medio poroso con una granulometría gruesa (Arena tamiz # 30), la segunda una granulometría fina (Arena tamiz # 50) y la tercera la presencia de trazador (Tabla 1). Además, se realizó una segmentación de las imágenes determinando a cuál de las tres clases pertenece cada píxel (Fig. 3).

Tabla 1. Caracterización del medio poroso.

Tipo de Arena	<i>K</i> (<i>md</i> -1)	<i>d</i> 60	<i>d</i> 10	<i>Cu</i>	<i>n</i>
30	225	900	590	1.52	0.45
50	16	390	160	2.43	0.35

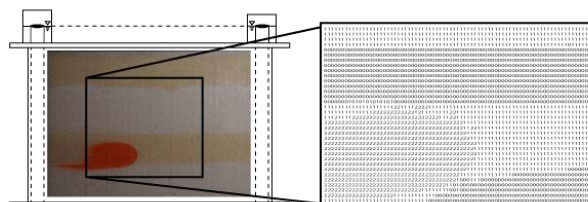


Figura 3. Segmentación de las imágenes (Elaborado por el autor).

4. Entrenamiento del modelo

Durante la etapa de aprendizaje, o entrenamiento de un modelo de CA, una de las mayores dificultades radica en determinar las reglas de transición a partir de la influencia que presentan los elementos de una vecindad a nivel temporal sobre el píxel (celda) central de la misma (Escandell Montero, 2014).

Para ello, se definió un diccionario, esquematizado en la (Fig. 4), donde se considera una vecindad (D2Q25, D: Dimensión del espacio, Q: número de píxeles de la vecindad) la cual en el instante *T* es denominada la llave, y en el instante *T*+1, es considerada un elemento asociado a ésta llave.

Para determinar cuál es la regla a seleccionar dentro del directorio, se realiza una escogencia probabilística de un elemento para cada llave. Es decir, dado que cada llave (estado inicial) tiene asociada varios elementos (estados de la vecindad en

el siguiente instante), se escogerá la regla de transición por probabilidad entre los diferentes elementos asociados a cada llave, mediante la generación de un número aleatorio x en el intervalo $[0,1)$.

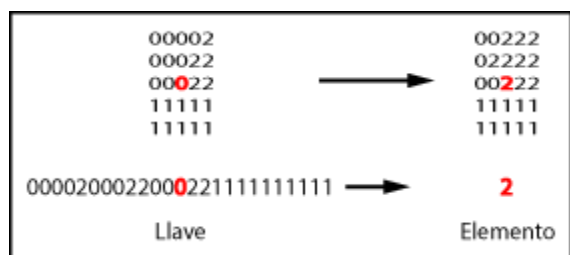


Figura 4. Definición de las llaves y los elementos asociados a ella. (Elaborado por el autor).



Figura 5. Selección de las reglas de transición (Elaborado por el autor).

Por ejemplo, en la Fig. 5, el pixel central de la vecindad (cero, 0) permutará a la clase 1 con una probabilidad nula (Esto porque el medio poroso se mantiene constante en función del tiempo), a 2 con una probabilidad $P(2)=15/23$, y no cambiará con una probabilidad de $P(0)= 8/23$.

Lo anterior, es descrito algorítmicamente mediante el siguiente pseudocódigo (Fig. 6), en el cual se define una función *probabilidad_acumulada*, la cual es inicializada en cero, y a ésta se le va sumando la probabilidad de ocurrencia de cada elemento de cada una de las llaves. Además se define una constante aleatoria α que hace las veces de criterio de selección de la regla a escoger para cada llave (estado). Así pues, si la *probabilidad_acumulada* es mayor que la variable α , se seleccionará la regla de transición definida por la llave y el último elemento al cual se le acumuló su probabilidad de ocurrencia.

```

función escoger(diccionario reglas,int [][] estado,float  $\alpha$ )
devuelve int
entradas: reglas, diccionario que relaciona estados con transiciones
            estado, matriz de int de  $l \times l$  que representa una vecindad
             $\alpha$ , número real  $\in [0,1)$ 
salida: entero que representa la transición del centro de la vecindad
            probabilidad_acumulada  $\leftarrow 0$ 
Para cada (transición,probabilidad) en reglas[estado]hacer
    probabilidad_acumulada
     $\leftarrow$  probabilidad_acumulada + probabilidad
    si (probabilidad_acumulada >  $\alpha$ ) entonces
        devolver transición
    fin si
fin hacer
    
```

Figura 6. Algoritmo de selección probabilística de las reglas de transición.

5. Resultados

Luego de aplicar el modelo CA anteriormente descrito y al transporte de solutos en medio poroso, es posible observar cualitativamente la alta correlación existente entre la simulación y las dinámicas de los fenómenos de transporte monitoreadas en el modelo físico (Fig. 7).

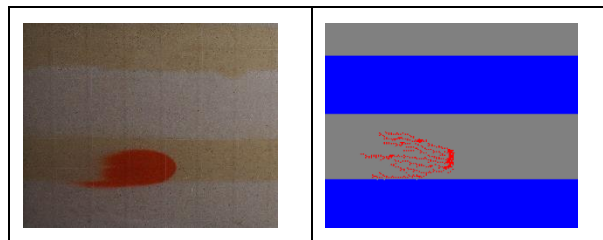


Figura 7. Relación entre la simulación y el modelo físico (Elaborado por el autor).

El modelo propuesto además permite seleccionar la configuración estratigráfica del medio poroso a analizar variando el espesor de cada estrato y tolera escoger uno o varios puntos de inyección del trazador (ver Fig. 8).

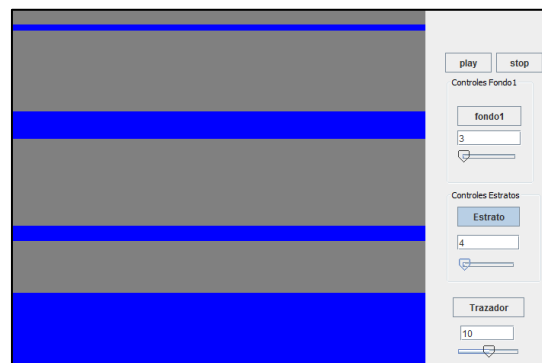


Figura 8. Interface gráfica del modelo de CA (Elaborado por el autor).

6. Conclusiones

Esta investigación hace posible pensar que la aplicación de modelos de Autómatas Celulares a los estudios de transporte de contaminantes en hidrogeología puede ser útil a futuro.

Sin embargo, esta metodología requiere de un amplio número de experimentos para entrenar el modelo, repercutiendo así en elevados costos, tiempo de calibración, y limitaciones en cuanto a las posibles configuraciones del medio poroso equivalente a estudiar.

Los CA fueron concebidos originalmente para el análisis de datos booleanos, razón por la cual en esta investigación se analizó el transporte de solutos sin tener en cuenta las variaciones en la concentración del mismo, temporal y espacialmente, sino únicamente considerando la presencia o no de contaminante en un punto específico. Por ello, no es posible cuantificar la dispersión hidrodinámica mediante la implementación del código propuesto, pero sí analizar cualitativamente el comportamiento hidrodinámico del soluto transportado.

Adaptaciones a este método, que utilicen una mayor segmentación (rangos de concentración del trazador), permitirían obtener soluciones cuantitativas posibilitando una mejor comprensión de los procesos hidrogeológicos y de transporte estudiados. Además, será posible obtener curvas de llegada BTC (Breakthrough Curve, Concentración vs Tiempo) a partir de las cuales se corroborará el principio de conservación de la masa, al integrar la función que describe dicha curva en varios puntos del sandbox (matriz universo).

Fenómenos de intrusión salina, zonas de mezcla, y e incluso transporte reactivo son susceptibles de ser abordados a partir de ésta metodología.

En ciencia, es importante considerar todas las alternativas a la hora de simular los fenómenos de la naturaleza. Por ello, abordar por primera vez la modelación de solutos desde el enfoque de los autómatas celulares es enriquecedor y abre la puerta a un camino, hasta ahora, no explorado.

Agradecimientos

Se le agradece al Laboratorio de Ensayos Hidráulicos de la Universidad Nacional de Colombia sede Bogotá por facilitar las instalaciones y equipos requeridos para desarrollar ésta investigación adecuadamente.

Referencias

Antigüedad, I., Ibarra, V., & Morales, T. (1989). Los trazadores en la hidrogeología kárstica: Metodología de su uso e interpretación de los ensayos de trazado. *MUNIBE*, 41 (31-45).

Escandell Montero, P. (2014). *Aprendizaje por refuerzo en espacios continuos: algoritmos y aplicación al tratamiento de la anemia renal*. Valencia: Universitat de Valencia.

Huerta Trujillo, I. (2009). *Simulación de sistemas naturales usando autómatas celulares*. Mexico: Instituto Politécnico Nacional. Centro de investigación en computación.

Juarez, G. J. (2000). *Teoría del campo promedio en Autómatas Celulares Similares a "The game of the life"*. Mexico.

Von Neumann, J. (1948). *The Computer and the Brain*. New Haven and London: Yale University Press.

Wolfram, S. (1983). statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, (55):601–644.

Zenil, H. (2009). Compression-based investigation of the dynamical properties of cellular automata and other systems. *Complex systems publication inc*, 1-3.

