

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL CÁLCULO DE LA TORTUOSIDAD EN LA ALFOMBRA DE SIERPINSKI

Christian Omar García-Muñoz¹, Carlos Gilberto Aguilar-Madera¹, Elsy Lizbeth Vázquez-Zarate¹
& Roberto Soto-Villalobos^{1,*}

¹ *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias de la Tierra*

* roberto.sotovll@uanl.edu.mx

Resumen

La tortuosidad es un parámetro importante para la descripción del flujo de fluidos en medios porosos, y se ha demostrado que los medios porosos en la naturaleza tienen características fractales. La alfombra de Sierpinski es un fractal exactamente similar a sí mismo, que ha sido utilizado para simular medios porosos fractales. En el presente trabajo se ha diseñado un autómata celular para el cálculo de la tortuosidad de la alfombra de Sierpinski. Para este fractal se ha calculado la tortuosidad de forma analítica y se han realizado aproximaciones. El resultado de este diseño de autómata ha sido excelentes aproximaciones a los resultados analíticos. A partir de ello se calculan otras tortuosidades de fractales que no tienen hasta ahora, respuestas analíticas. El presente modelo puede tener potencial en el análisis de las propiedades de transporte en otros medios porosos.

Palabras claves

Alfombra de Sierpinski, Tortuosidad, Porosidad, Autómata Celular, Fractal

Abstract

Tortuosity is an important parameter for the description of fluid flow in porous media, and porous media in nature have been shown to have fractal characteristics. The Sierpinski carpet is a fractal exactly similar to itself, which has been used to simulate fractal porous media. In the present work, a cellular automaton has been designed to calculate the tortuosity of the Sierpinski carpet. For this fractal, the tortuosity has been calculated analytically and with other approximations. The result of this automaton design has been excellent approximations to the analytical results. From this, other fractal tortuosities are calculated that do not have, until now, analytical answers. The present model may have potential in the analysis of transport properties in other porous media.

Keywords

Sierpinski Carpet, Tortuosity, Porosity, Cellular Automata, Fractal

García-Muñoz, C.O., Aguilar-Madera, C.G., Vázquez-Zarate, E.L. & Soto-Villalobos, R. (2023): Simulación numérica del cálculo de la tortuosidad en la alfombra de Sierpinski. – en: Montalvo Arrieta, J.C., Ramírez Fernández, J.A., Aguilar-Madera, C.G., Jenchen, U., Salinas Jasso, J.A., Velasco-Tapia, F. & Navarro-de León, I. (eds.): Número especial en conmemoración del 90° Aniversario de la Universidad Autónoma de Nuevo León y del 40° Aniversario de la Facultad de Ciencias de la Tierra. – Actas de la Facultad de Ciencias de la Tierra, UANL, Linares, **9** (2023): 33-41.

Introducción

En particular, la porosidad y la permeabilidad son cantidades importantes en el estudio del agua subterránea e hidrocarburos porque proporcionan las propiedades mecánicas y de transporte de un medio poroso (Cihan et al., 2009; Xiao et al., 2012; Shou et al., 2014). Se utilizan diferentes parámetros para modelar y simular el flujo de fluidos en un medio poroso, como la tortuosidad (Freytang & Roque, 2013; Garza-López et al., 2000), el tamaño máximo de poro (Cai & Yu, 2010; Xiao et al., 2013), el área de superficie específica (Matyka et al., 2008) y la distribución del tamaño de poro (Perrier et al., 1996; Perfect & Kay, 1995; Shou et al., 2010), etc. El concepto de tortuosidad fue introducido por primera vez por Carman en 1937 (Carman, 1937) como un parámetro que describe la elongación promedio de las vías de flujo microscópico de fluidos (partículas) en medios porosos con respecto al flujo libre (Duda et al., 2011).

Se ha utilizado el modelo de Kozeny-Carman (KC) para expresar la relación entre la permeabilidad K y ϕ la porosidad, es decir.

$$K = \frac{\phi^3}{C_f \tau^2 (1-\phi)^2 S^2} \quad (1)$$

donde C_f es una constante relacionada con la forma del poro, S es el área específica del medio poroso, ϕ es la porosidad del medio poroso y τ es la tortuosidad. La tortuosidad del flujo en medios porosos generalmente se define como la relación entre la distancia real del flujo y la longitud del medio poroso, es decir:

$$\tau = \frac{L_e}{L} \quad (2)$$

donde L_e es la distancia real del flujo y L es la longitud del medio poroso. Se sabe que el camino tortuoso que sigue un material transportado es microscópicamente muy complicado. Por lo tanto, la tortuosidad del camino del flujo en medios porosos se determina convencionalmente en experimentos (Wyllie & Gregory, 1955; Comiti & Renaud, 1989).

En 1989, Comiti y Renaud (Comiti & Renaud, 1989) desarrollaron una relación entre la tortuosidad con la fracción vacía e y los parámetros geométricos de partículas empaquetada (a = longitud, e = espesor) en la forma:

$$\tau = 1 + 0.58 \exp\left(\frac{0.18a}{e}\right) \ln\left(\frac{1}{e}\right) \quad (3)$$

Koponen et al. (1997), propuso la siguiente expresión

$$\tau = 1 + 0.65 \frac{1-\phi}{(\phi-0.33)^{0.19}} \quad (4)$$

Sobre la base de un medio poroso artificial 2D compuesto por rectángulos de igual tamaño y superposición ilimitada

ubicados al azar, y porosidad ϕ . Los investigadores simularon el método de automatización celular de gas de red para el flujo de fluidos, centrándose en la estimación de la permeabilidad y la porosidad efectiva.

(Yu & Jian-Hua, 2004) desarrollaron una expresión analítica basada en los caminos geométricos formados alrededor de arreglos regulares de partículas cuadradas que representan los medios porosos. Los investigadores propusieron la siguiente ecuación:

$$\tau = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \sqrt{1-\phi} + \frac{\sqrt{(\sqrt{1-\phi}-1)^2 + (1-\phi)/4}}{1-\sqrt{1-\phi}} \right] \quad (5)$$

En la literatura se ha reconocido una relación lineal entre tortuosidad y porosidad a través de diferentes técnicas. Para mencionar algunos ejemplos (Feraníc & Latief, 2013) desarrolló la siguiente ecuación:

$$\tau = 1 + p(1-\phi) \quad (6)$$

Donde $p = 0.716 \pm 0.013$ considerando alfombras de Sierpinski aleatorias hasta la cuarta iteración.

La alfombra de Sierpinski representa un modelo sintético para medios porosos fractales autosimilares. Varios investigadores han estudiado las propiedades de transporte para el flujo, la difusión y el calor en un modelo fractal de este tipo. De alguna manera, la tortuosidad está involucrada en la definición de propiedades de transporte asociadas como permeabilidad o difusión efectiva (Aguilar-Madera et al., 2021) y en la literatura se han derivado ecuaciones simples. Por ejemplo, (Li & Yu, 2011) encontró la expresión:

$$\tau_n = \left(\frac{19}{18}\right)^n \quad (7)$$

donde n se refiere a la generación (iteración) de partículas sólidas. La ecuación anterior se derivó del análisis de trayectorias simples alrededor de las partículas sólidas. De manera similar, para las alfombras de Sierpinski y las alfombras de Sierpinski modificadas con inclusiones circulares (Ebrahimi-Khabbazi et al., 2015) presentó una ecuación analítica para la tortuosidad, que es válida para las alfombras de Sierpinski de alta generación donde los métodos basados en mallas cuadradas se vuelven computacionalmente costosos. Para la alfombra de Sierpinski la ecuación propuesta es:

$$\tau_n = \frac{3}{2} - \frac{\phi_n}{2} \quad (8)$$

Mientras que la alfombra de Sierpinski con inclusiones circulares es:

$$\tau_n = \frac{4}{\pi} + \left(1 - \frac{4}{\pi}\right) \phi_n \quad (9)$$

Se han empleado otros métodos para determinar la tortuosidad en la alfombra de Sierpinski, entre estos se encuentran la solución numérica de problemas de flujo de fluidos. Suponiendo un flujo laminar newtoniano 2D, (Luo et al., 2014) derivó la ecuación:

$$\tau = 0.946 - 0.408 \ln \phi_n \quad (10)$$

En este caso la porosidad se calcula según la generación n de la siguiente manera

$$\phi_n = \left(\frac{8}{9}\right)^n \quad (11)$$

La tortuosidad es un parámetro importante para la descripción del flujo de fluidos en medios porosos, y se ha demostrado que los medios porosos en la naturaleza tienen características fractales (Luo et al., 2014). En teoría, los fractales pueden ser infinitamente auto similares, lo que significa que pueden contener una forma geométrica particular (cuadrado y círculo) en un rango infinito de escalas de longitud. Por lo tanto, pueden ser útiles para representar materiales porosos que contienen amplias distribuciones de tamaños de partículas en varias escalas de longitud. Como ejemplo, la n -ésima generación de un fractal puede representar poros medios que contienen granos de n tamaños distintos (Ebrahimi-Khabbazi et al., 2015).

En el presente trabajo se utiliza la alfombra de Sierpinski como representación de un medio poroso, para calcular la tortuosidad y simular a partir de autómatas celulares con diferentes condiciones que representen el flujo a través del medio poroso.

Metodología

Alfombra de Sierpinski

La alfombra de Sierpinski (Figura 1) es un fractal de uso común (Li & Yu, 2011; Feranie & Latief, 2013; Luo et al., 2014) con una larga historia de aplicación en medios porosos naturales (Garrison Jr. et al., 1992; Doughty & Karasaki, 2002). La alfombra de Sierpinski es una geometría determinista y matemáticamente elegante, por lo tanto, se resuelve comúnmente como un caso especial para proporcionar información sobre la tortuosidad en los medios porosos fractales. En consecuencia, el fractal puede actuar como un dominio de referencia apropiado para modelar el transporte en medios porosos que consisten en amplias distribuciones de tamaños de partículas (Doughty & Karasaki, 2002).

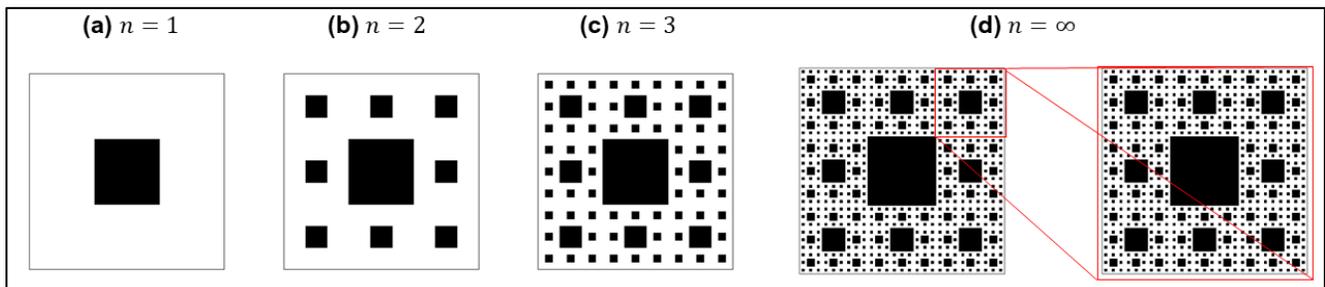


Figura 1: Iteraciones de la alfombra de Sierpinski: a) primera iteración $n=1$, b) segunda iteración $n=2$, c) tercera iteración $n=3$, d) cuarta iteración hasta el infinito, que presenta autosimilitud; la pieza aumentada en los extremos superiores es idénticamente similar al conjunto (modificado de Bazarin et al., 2021).

Autómata Celular

El concepto de autómata celular fue introducido por John Von Neumann en 1940 y posteriormente por John Horton Conway y Stephen Wolfram. Se define al autómata celular (AC) (Adamatzky, 2010) como un modelo matemático y computacional para un sistema dinámico que evoluciona en pasos discretos. Es adecuado para modelar sistemas naturales que puedan ser descritos como una colección masiva de objetos simples que interactúen localmente unos con otros.

Para este trabajo se diseñó 2 autómatas celulares, los cuales tienen diferentes condiciones, capacidad de movimiento de

moverse y simular el flujo a través del medio (Figura 2). A continuación, se muestra una lista de los posibles movimientos, donde se podrían mover los autómatas celulares.

1. $x = x_{\text{inicial}}$
 $y = y_{\text{inicial}} + \text{pasoy}$
2. $x = x_{\text{inicial}} + \text{pasox}$
 $y = y_{\text{inicial}}$
3. $x = x_{\text{inicial}}$
 $y = y_{\text{inicial}} - \text{pasoy}$

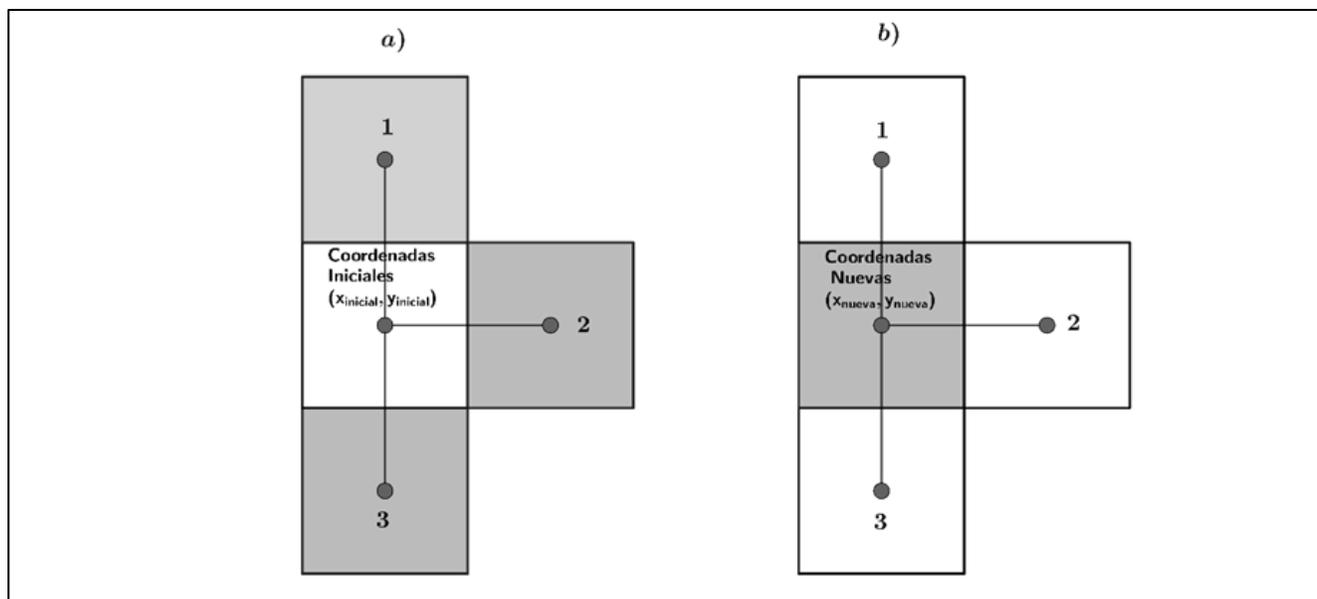


Figura 2: Posibles movimiento del autómata celular con coordenadas iniciales (x, y); b) Nuevas coordenadas del autómata celular según la casilla hacia donde se movió.

Random Walks

Las caminatas aleatorias (Pearson, 1905) se utilizan como una simulación numérica para entender el fenómeno del transporte en diferentes medios. Como se mencionó anteriormente, son cualquier proceso aleatorio donde la posición

de un objeto en el espacio y tiempo depende solo de su posición representado por un sistema de coordenadas en algún instante previo y alguna variable aleatoria que determina su subsecuente dirección, longitud y paso. Las caminatas aleatorias se generarán a partir de cada condición de los autómatas celulares propuestos anteriormente.

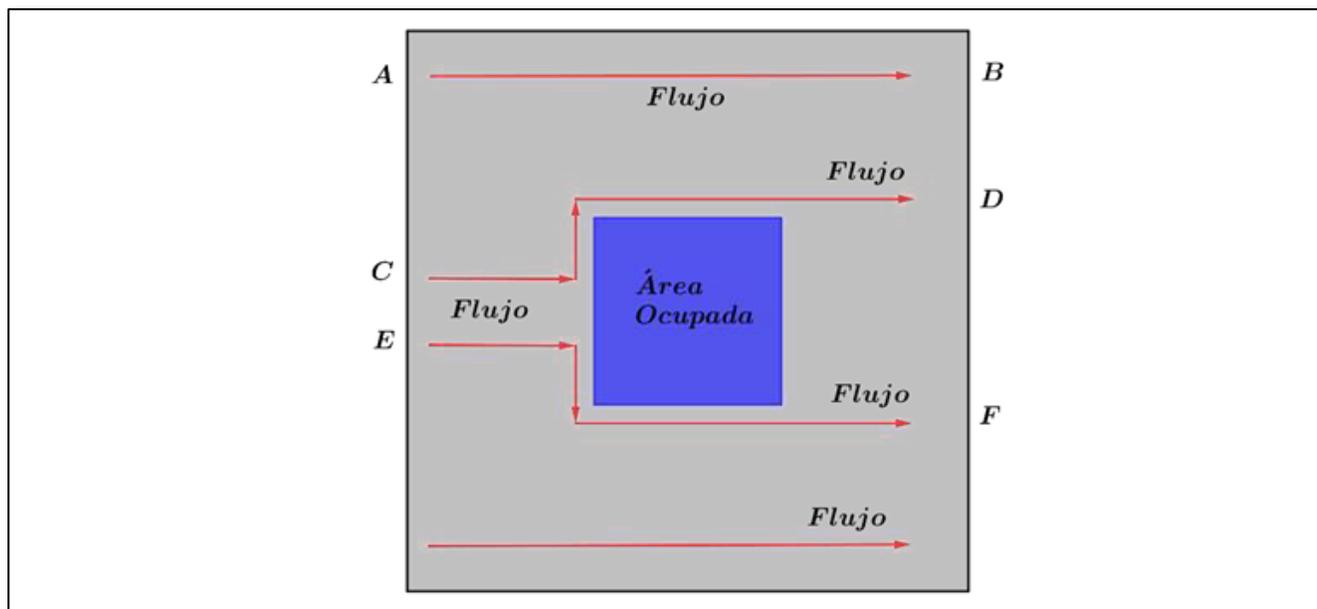


Figura 3: Representación del flujo a través de la alfombra de Sierpinski n=1 (modificado de Li & Yu, 2011).

Algoritmo 1: Suma de áreas.

```
1:   Input: P (vértices del polígono  $P_1, P_2, \dots, P_N$  y aristas  $l_1, l_2, \dots, l_N$ ) y q (punto)
2:   Output: Dentro (una variable que se establece en verdadero si q está dentro de P y falso en caso contrario)
3:   Calcular el área total T del polígono  $\text{sum\_área} = 0$ 
4:   for todas las aristas  $l_i$  del polígono do
5:       acumular el área del triángulo  $(P_i, P_{i+1}, q)$  a  $\text{sum\_área}$ 
6:       if  $\text{sum\_área} = T$  then
7:           Dentro=Verdadero
8:       else
9:           Dentro=Falso
10:      end if
11:  end for
```

A través de las caminatas aleatorias se calculará la tortuosidad (τ) usando el promedio de la distancia que recorrió a través de la alfombra de Sierpinski utilizado como medio poroso. Una ventaja sobre otros estudios experimentales es que

se puede simular millones de partículas, guardar sus trayectorias, lo que supone una disminución de trabajo y horas de experimentación en laboratorio (Briones-Carrillo, 2021).

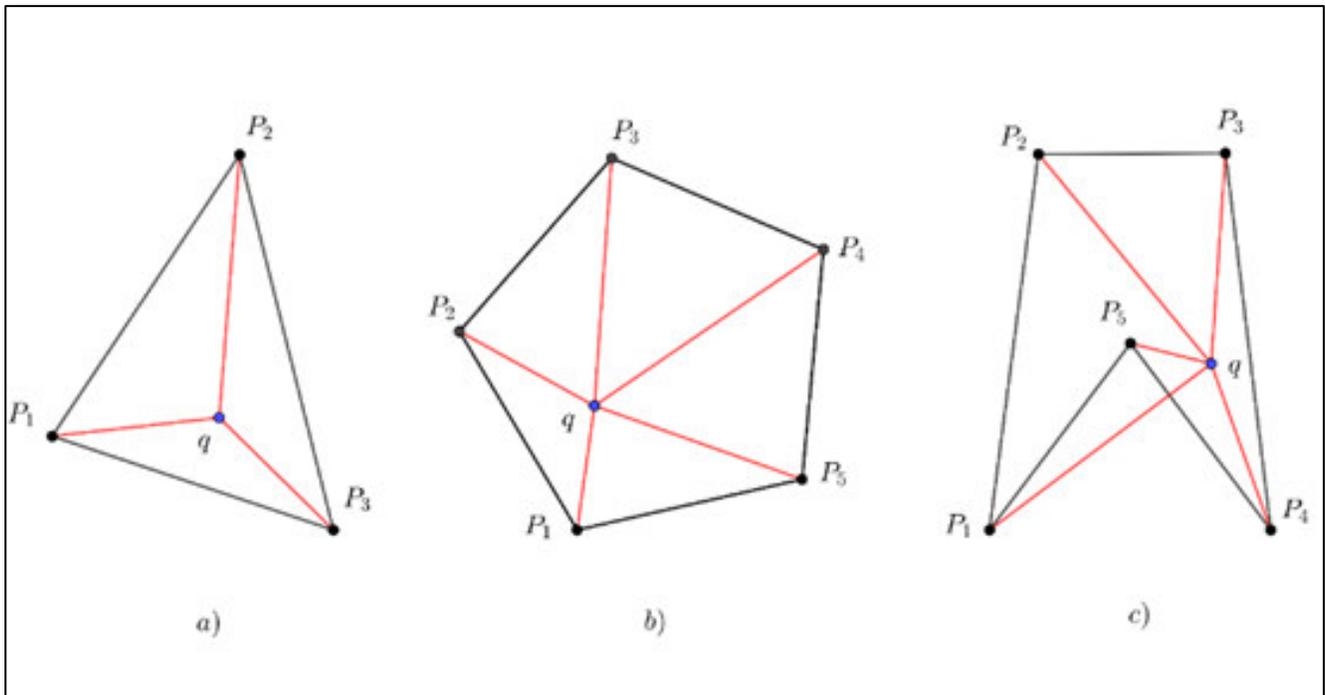


Figura 4: Método de suma de áreas (modificado de Huang & Shih (1997)).

Simulación de flujo a través de la alfombra de Sierpinski

Como se mencionó anteriormente, la alfombra de Sierpinski es un fractal de uso común, ya que actúa como un medio poroso. Teniendo en cuenta que la alfombra de Sierpinski representa un

medio poroso nos hace pensar que los cuadros en color negro (Figura 1) representan el área ocupada y los poros representarían el resto del área. La generación de las caminatas aleatorias dentro de la alfombra de Sierpinski, no respetaría el área ocupada por los cuadrados dependiendo de la iteración. Sin embargo, la idea de cada camino aleatorio es el respetar el área ocupada, esto se puede mostrar en la Figura 3.

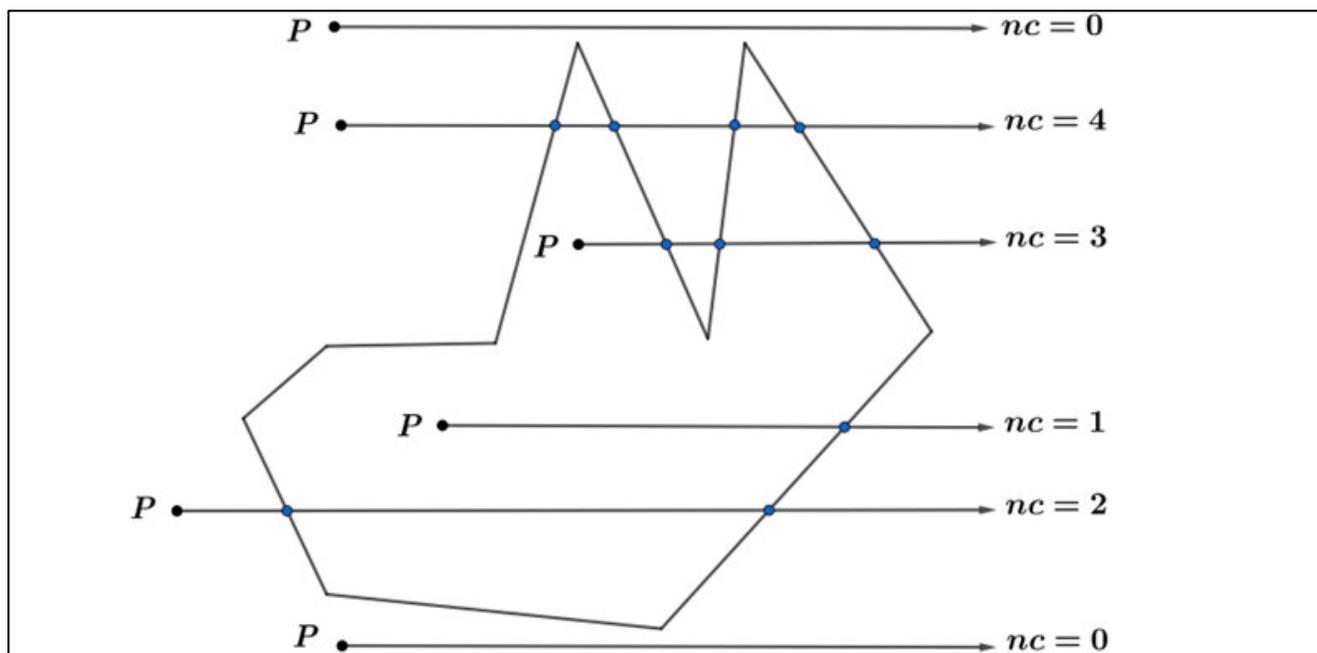


Figura 5: Puntos P que están dentro y fuera del polígono, donde se intersecta con los bordes contabilizando el número de cruces (modificado de Sunday, 2021).

Punto dentro de polígonos

tomar decisiones que modifiquen la trayectoria, de tal manera que sigan fluyendo a través de los poros y respeten el área ocupada. Nordbeck & Rystedt (1967) y (Huang & Shih, 1997) propusieron algoritmos para saber si un punto está dentro de un polígono o se encuentra afuera. En este trabajo se utilizaron dos algoritmos: suma de áreas y número de intersecciones en los lados del polígono. El algoritmo suma de áreas establece que si el punto q está dentro del polígono P, luego conectando q con cada nodo de P subdividirá P en varios triángulos, y la suma del área de estos triángulos es equivalente al área del polígono P (ver Figura 4).

El algoritmo número de cruzado cuenta el número de veces que un rayo que parte de un punto P cruza el borde del límite de un polígono. Si este número es par, entonces el punto está afuera; de lo contrario, cuando el número de cruce es impar, el punto está dentro (Sunday, 2021; Figura 5).

En particular, los casos especiales en los que el rayo pasa por un vértice deben manejarse adecuadamente. El número de cruzado selecciona un rayo horizontal que se extiende a la derecha de P y paralelo al eje x positivo. Usando este rayo específico, es fácil calcular la intersección de un borde de polígono con él. Es aún más fácil determinar cuándo no es posible tal intersección. Para calcular el total de cruces, nc, el algoritmo simplemente recorre todos los bordes del polígono, prueba cada cruce e incrementa nc cuando ocurre uno. Adicionalmente, la prueba de cruce debe manejar los casos especiales y puntos en un borde. A continuación se muestran las reglas de cruzado (Sunday, 2021):

1. Un borde ascendente incluye su extremo inicial y excluye su extremo final.
2. Un borde descendente excluye su extremo inicial e incluye su extremo final.
3. Se excluyen los bordes horizontales.
4. El punto de intersección borde-rayo debe estar estrictamente a la derecha del punto P

Algoritmo 2 Número de cruzado.

1:	Input: P (vértices del polígono P_1, P_2, \dots, P_N) y $q = (x_0, y_0)$ (punto)
2:	Output: dentrofuera=0, es par(Fuera); dentrofuera=1, es impar(Dentro)
3:	$c \leftarrow 0$
4:	for i in 1:(length(P_N)-1) do
5:	if ((($P_y[i] \leq y_0$ && ($P_y[i+1] > y_0$)) (($P_y[i] > y_0$ && ($P_y[i+1] \leq y_0$)))) then
6:	$vt \leftarrow (y_0 - P_y[i]) / (P_y[i+1] - P_y[i])$
7:	$x_{intersect} \leftarrow P_x[i] + vt * (P_x[i+1] - P_x[i])$
8:	end if
9:	if ($x_0 < x_{intersect}$) then
10:	$c \leftarrow c + 1$
11:	end if
12:	if c=número par then
13:	dentrofuera $\leftarrow 0$
14:	else
15:	dentrofuera $\leftarrow 1$
16:	end if
17:	end for

Simulación numérica

Para la simulación numérica y el cálculo de la tortuosidad (τ) en la alfombra de Sierpinski se toma en cuenta la decisión de los caminos aleatorios a medida que van fluyendo a través de los poros en dos posibles decisiones. La primera es que, en cuanto se tope con un área ocupada como lo es los cuadrados, elija de manera aleatoria hacia arriba o hacia abajo seguir la trayectoria, le llamaremos célula 1 (ver Figura 6). La segunda es que, los caminos que se estarán generando en la frontera serán capaces de elegir la trayectoria del flujo. En este caso si el camino del autómata celular empieza en < 0.5 el trayecto se iría por debajo, mientras que si es ≥ 0.5 el trayecto se iría por encima, le llamaremos célula 2 (ver Figura 7).

Conclusiones

Con base a la metodología presentada en este documento, es posible obtener una aproximación comparable a los resultados teóricos de la tortuosidad en el fractal de Sierpinski, para cada generación.

El diseño de este autómata permitirá calcular la tortuosidad de otras propuestas ya sean fractales o no, en los cuales no se ha calculado de forma analítica.

De los algoritmos propuestos, el algoritmo 2 tiene un mejor desempeño computacionalmente, por su simplicidad en su programación y el tiempo de cómputo es menor. Este algoritmo puede tener mejoras es su desempeño en tiempo computacional.

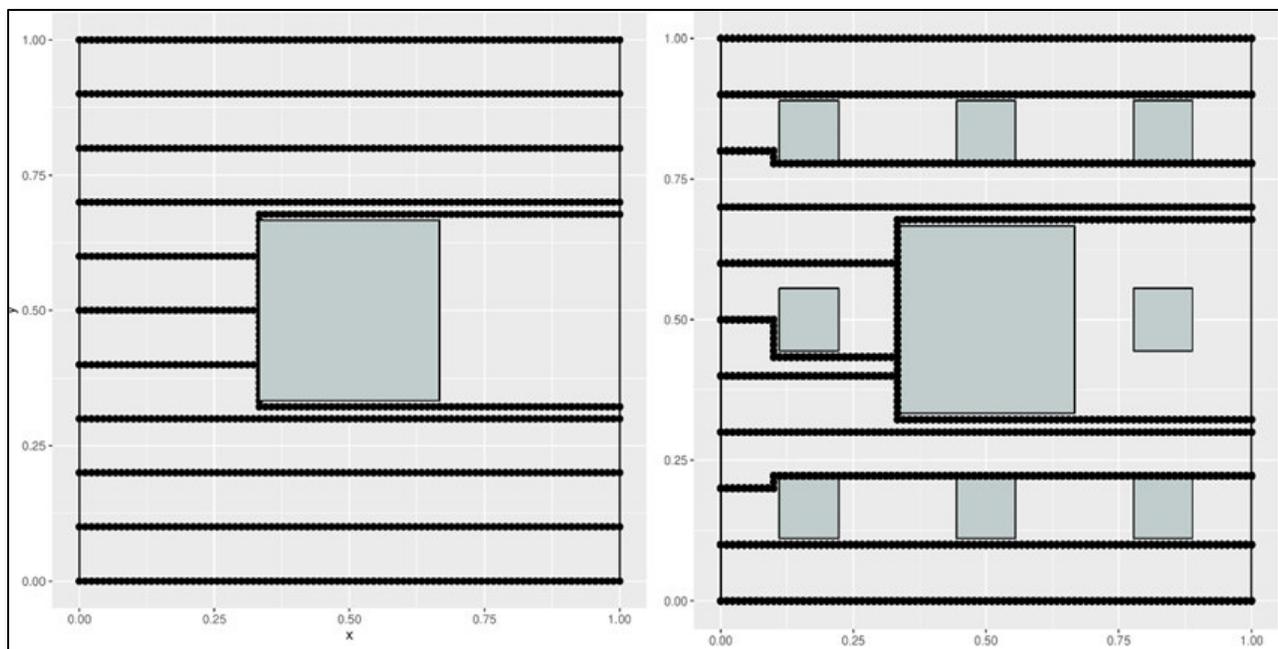


Figura 6: Comportamiento de trayectorias de autómatas celulares 1 para la alfombra de Sierpinski generación $n=1$ y $n=2$.

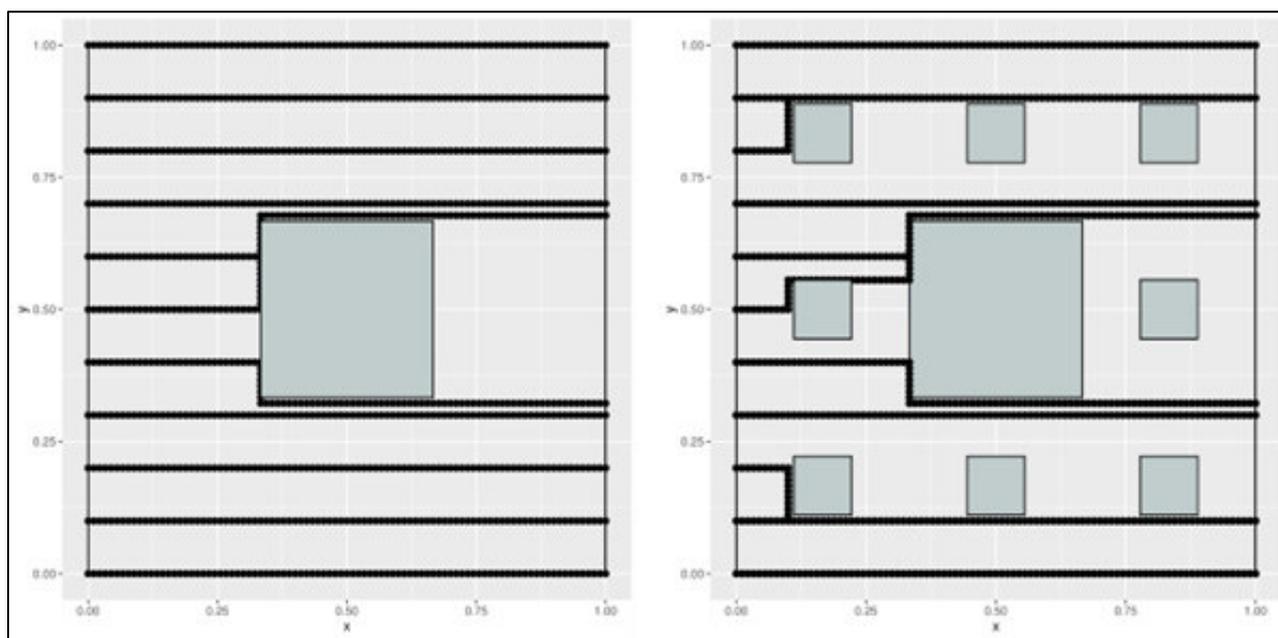


Figura 7: Comportamiento de trayectorias de autómatas celulares 2 para la alfombra de Sierpinski generación $n=1$ y $n=2$.

Referencias

Adamatzky, A. (2010): Game of life cellular automata. – 579 p.; Dordrecht Heidelberg New York, London (Springer).
<https://doi.org/10.1007/978-1-84996-217-9>.

Aguilar-Madera, C., Herrera-Hernández, E., Espinosa-Paredes, G. & Briones-Carrillo, J. (2021): On the effective diffusion in the Sierpinski carpet. – Computational Geosciences, **25**: 467-473.

- Bazarin, R.L., De Lai, F.C., Naaktgeboren, C. & Junqueira, S.L. (2021): Boundary effects on the tortuosity and permeability of idealized porous media. – *Transport in Porous Media*, **136(3)**: 743-764.
- Briones-Carrillo, J.A. (2021): Estimación de parámetros petrofísicos en rocas clásticas utilizando métodos heurísticos. – Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias de la Tierra, UANL; Linares, N.L.
- Cai, J. & Yu, B. (2010): Prediction of maximum pore size of porous media based on fractal geometry. – *Fractals*, **18**: 417-423.
- Carman, P.C. (1937): Fluid flow through granular beds. – *Trans. Inst. Chem. Eng.*, **15**: 150-166.
- Cihan, A., Sukop, M.C, Tyner, J.S., Perfect, E. & Huang, H. (2009): Analytical predictions and lattice Boltzman simulations of intrinsic permeability for mass fractal porous media. – *Vadose Zone Journal*, **8**: 187-196.
- Comiti, J. & Renaud, M. (1989): A new model for determining mean structure parameters of fixed beds from pressure drop measurements: application to beds packed with parallelepipedal particles. – *Chemical Engineering Science*, **44**: 1539-1545.
- Doughty, C. & Karasaki, K. (2002): Flow and transport in hierarchically fractured rock. – *Journal of Hydrology*, **263**: 1-22.
- Duda, A., Koza, Z. & Matyka, M. (2011): Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow. – *Physical Review*, **E (84)**: 036319.
- Ebrahimi-Khabbazi, A., Hinebaugh, J. & Bazylak, A. (2015): Analytical tortuosity-porosity correlations for sierpinski carpet fractal geometries. – *Chaos, Solitons and Fractals*, **78**: 124-133.
- Feranie, S. & Latief, F.D. (2013): Tortuosity-porosity relationship in two-dimensional fractal model of porous media. – *Fractals*, **21**: 1350013.
- Freytang, I. & Roque, W.L. (2013): Influence of granular packing on porosity and tortuosity. – *Physical Review*, **E (88)**: 023011.
- Garrison Jr., J.R., Pearn, W.C. & von Rosenberg, D. (1992): The fractal menger sponge and Sierpinski carpet as models for reservoir rock/pore systems: I.; theory and image analysis of Sierpinski carpets. – *In situ*, **16(4)**; United States.
- Garza-López, R.A., Naya, L. & Kozak, J.J. (2000): Tortuosity factor for permeant flow through a fractal solid. – *The Journal of Chemical Physics*, **112**: 9956-9960.
- Huang, C.W. & Shih, T.Y. (1997): On the complexity of point-in-polygon algorithms. – *Computers & Geosciences*, **23**: 109-118.
- Koponen, A., Kataja, M. & Timonen, J. (1997): Permeability and effective porosity of porous media. – *Phys. Rev.*, **E(56)**: 3319-3325.
- Li, J.H. & Yu, B.M. (2011): Tortuosity of flow paths through a sierpinski carpet. – *Chinese Physics Letters*, **28**: 034701.
- Luo, L., Yu, B., Cai, J. & Zeng, X. (2014): Numerical simulation of tortuosity for fluid flow in two-dimensional pore fractal models of porous media. – *Fractals*, **22**: 1450015.
- Matyka, M., Khalili, A. & Koza, Z. (2008): Tortuosity-porosity relation in porous media flow. – *Physical Review*, **E(78)**: 026306.
- Nordbeck, S. & Rystedt, B. (1967): Computer cartography point-in-polygon programs. – *BIT Numerical Mathematics*, **7**: 39-64.
- Pearson, K. (1905): The problem of the random walk. – *Nature*, **72**: 294-294.
- Perfect, E. & Kay, B. (1995): Applications of fractals in soil and tillage research: a review. – *Soil and Tillage Research*, **36**: 1-20.
- Perrier, E., Rieu, M., Sposito, G. & de Marsily, G. (1996): Models of the water retention curve for soils with a fractal pore size distribution. – *Water Resources Research*, **32**: 3025-3031.
- Shou, D., Fan, J. & Ding, F. (2010): A difference-fractal model for the permeability of fibrous porous media” . – *Physics Letters A*, **374**: 1201-1204.
- Shou, D., Fan, J., Mei, M. & Ding, F. (2014): An analytical model for gas diffusion through nanoscale and microscale fibrous media. – *Microfluidics and nanofluidics*, **16**: 381-389.
- Sunday, D. (2021): *Practical Geometry Algorithms with C++ Code*. – s.l.: Daniel Sunday.
- Von Neumann, J. (1951): *The general and logical theory of automata*. – ed. s.l.:s.n.
- Wyllie, M. & Gregory, A. (1955): Fluid flow through unconsolidated porous aggregates. – *Industrial & Engineering Chemistry*, **47**: 1379-1388.
- Xiao, B., Fan, J. & Ding, F. (2012): Prediction of relative permeability of unsaturated porous media based on fractal theory and monte carlo simulation. – *Energy & Fuels*, **26**: 6971-6978.
- Xiao, B., Yang, Y. & Chen, L. (2013): Developing a novel form of thermal conductivity of nanofluids with brownian motion effect by means of fractal geometry. – *Powder Technology*, **239**: 409-414.
- Yu, B., Jian-Hua, L. (2004): A geometry model for tortuosity of flow path in porous media. – *Chinese Physics Letters*, **21**: 1569.