



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



## Aplicação de Autômato Celular para Fluidos

Andréa Baima do Lago Silva

Manaus –AM

2009



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



## Aplicação de Autômato Celular para Fluidos

Andréa Baima do Lago Silva

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas, como parte dos pré-requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

**Orientadora:** Prof<sup>a</sup> PhD. Marta Silva dos Santos Gusmão

Manaus –AM

2009

**Aos meus familiares e mestres.**

# Agradecimentos

Ao Senhor Deus Pai pelo amor incondicional, ajuda e dificuldades, que me motivaram a continuar.

A prof<sup>a</sup> Marta Gusmão pela sua orientação, calma e paciência com que me conduziu a este trabalho.

Aos meus Pais, Francisca da Silva Baima e Benedito Baima do Lago Sobrinho, por todos os conselhos, amor e cuidados.

Ao meu marido, Deniz dos Santos Mota, pelo apoio, conselho, ajuda e carinho.

Em especial, a todos os professores da minha vida escolar que me ensinaram e contribuíram para minha formação.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract</b>	<b>x</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Equações Básicas da Dinâmica dos Fluidos</b>	<b>5</b>
2.1 Derivada Total . . . . .	8
2.2 Equação de Conservação da Massa . . . . .	9
2.3 Equação de Conservação do Momento . . . . .	12
2.3.1 Equação Diferencial de Euler . . . . .	17
<b>3 Autômato Celular</b>	<b>18</b>
3.1 Desenvolvimento Histórico . . . . .	18
3.2 Definição . . . . .	21
3.3 Vizinhanças . . . . .	23
3.4 Condições de Fronteira . . . . .	24
3.5 Modelo HPP . . . . .	25
3.6 Modelo FHP . . . . .	27
3.6.1 Regras de colisão do modelo FHP . . . . .	28
3.7 Aplicações . . . . .	29

<b>4</b>	<b>Modelo de Gás de Rede</b>	<b>32</b>
4.1	Princípios Básicos . . . . .	32
4.2	Base para a Teoria Cinética . . . . .	35
4.3	Equações da Teoria Cinética . . . . .	35
4.3.1	Equação de Transporte de Boltzmann . . . . .	36
4.4	Leis de Conservação . . . . .	38
4.4.1	Equação de Conservação de Massa . . . . .	38
4.4.2	Equação de Conservação de Momento Linear . . . . .	39
4.4.3	Relações úteis . . . . .	41
4.5	Expansão de Chapman-Enskog . . . . .	41
4.6	Equações de Navier-Stokes . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Resultados das Simulações</b>	<b>47</b>
5.1	Armazenamento de Dados . . . . .	47
5.1.1	Regras de Colisão . . . . .	48
5.2	Algoritmo do Código-Fonte . . . . .	49
5.3	Visualização . . . . .	53
5.4	Simulações . . . . .	53
5.4.1	Duto horizontal sem barreira . . . . .	53
5.4.2	Duto Horizontal com Barreira $10 \times 10$ . . . . .	54
5.4.3	Duto em forma de "L" sem barreira . . . . .	58
5.4.4	Duto em forma de "L" com barreira . . . . .	62
<b>6</b>	<b>Comentários Finais</b>	<b>82</b>

# Lista de Figuras

0.1	Rio Solimões, próximo a cidade de Coari/Am. . . . .	ix
1.1	Rio Amazonas. . . . .	3
1.2	Rio Solimões. . . . .	4
2.1	Componentes da força que atuam numa superfície diferencial arbitrária. .	6
2.2	Movimento de um elemento do fluido em expansão. . . . .	10
2.3	Notação para as tensões. . . . .	14
2.4	Componentes na direção $x$ das forças superficiais que atuam num elemento fluido. . . . .	15
3.1	Autômato celular bidimensional segundo Von Neumann. . . . .	19
3.2	Evolução do autômato celular unidimensional . . . . .	20
3.3	Vizinhança von Neumann (a)-Raio 1 e (b)-Raio 2. . . . .	23
3.4	Condições de fronteira. . . . .	24
3.5	HPP: Configuração mostrando partículas microscópicas distribuídas em uma malha retangular. . . . .	25
3.6	Possíveis casos de colisão entre duas partículas. . . . .	26
3.7	Cada partícula tem seis vizinhos em uma rede hexagonal. . . . .	27

3.8	Exemplos de regras de colisão para uma rede hexagonal. A regra para configurações que não estão mostradas é que a velocidade não mude após a colisão. O número abaixo representa a maneira como as velocidades no sítio da rede são codificadas. O símbolo $\leftrightarrow$ representa que a regra é aplicada tanto da direita para a esquerda como vice-versa. . . . .	30
3.9	Padrões gráficos gerados por um autômatos celulares . . . . .	31
3.10	O rio Solimões, que recebe este nome entre a fronteira entre do Peru e a cidade de Manaus, onde passa a se chamar rio Amazonas. . . . .	31
4.1	Célula hexagonal com os vetores de ligação. . . . .	33
4.2	Exemplo de uma regra pré-definida. . . . .	34
4.3	Colisões com conservação. . . . .	36
5.1	Regras de colisão entre partículas com conservação de momento. . . . .	49
5.2	Fluxograma do código-fonte utilizado para a simulação do escoamento de um fluido. . . . .	50
5.3	Sítio 52, numa rede $50 \times 50$ e seus vizinhos mais próximos. . . . .	51
5.4	Trecho do código-fonte da subrotina de atualização. . . . .	52
5.5	Representação da média de vetores de cada célula na configuração inicial em um duto linear e horizontal. . . . .	54
5.6	Campo de velocidades de um fluido em um duto horizontal, em $t = 1$ . . .	55
5.7	Campo de velocidades de um fluido em um duto horizontal, em $t = 25$ . .	55
5.8	Campo velocidades de um fluido em um caminho duto, em $t = 50$ . . . .	56
5.9	Campo de velocidades de um fluido em um caminho horizontal com barreira $10 \times 10$ , em $t = 1000$ , usando condições periódicas nas fronteiras. . .	56
5.10	Campo de velocidades de um fluido em um caminho horizontal com barreira $10 \times 10$ , em $t = 1000$ , usando condições de reflexão e inversão nas fronteiras verticais e na barreira. . . . .	57
5.11	Duto em forma de "L" que será percorrido pelo fluido. . . . .	58



5.12	Condição inicial de um duto em $L$ , para uma rede $50 \times 50$ com $L_{x1} = 25$ e $L_{x2} = 25$ . . . . .	59
5.13	Campo de velocidades em um duto em forma de $L$ sem barreiras, no passo $t = 20$ . . . . .	59
5.14	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ sem barreiras, no passo 47. . . . .	60
5.15	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ sem barreiras, no passo 100. . . . .	61
5.16	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ sem barreiras, no passo 140. . . . .	61
5.17	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 100 passos. . . . .	63
5.18	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 140 passos. . . . .	64
5.19	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 200 passos. . . . .	65
5.20	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 200 passos. . . . .	66
5.21	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo. . . . .	67
5.22	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo. . . . .	68
5.23	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 10$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo. . . . .	69

5.24	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 5$ , após 200 passos. . . . .	70
5.25	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo. . . . .	71
5.26	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo. . . . .	72
5.27	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $10 \times 5$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo. . . . .	73
5.28	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 10$ , após 200 passos. . . . .	74
5.29	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo. . . . .	75
5.30	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo. . . . .	76
5.31	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 10$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo. . . . .	77
5.32	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 5$ , após 200 passos. . . . .	78
5.33	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo. . . . .	79

5.34	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo. . . . .	80
5.35	Campo de velocidades em um trecho em forma de $L$ com barreira $5 \times 5$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo. . . . .	81
6.1	Esteira de Vórtices de von Kármán, utilizando método de diferenças finitas, por Armando Fortuna [8]. . . . .	83
6.2	Esteira de Vórtices de von Kármán, utilizando método de gás de rede, obtido na ref.[21]. . . . .	84

# Resumo

A Amazônia guarda 70% de toda a água doce do Brasil [1], contudo, a presença do homem faz com que ocorra poluição em nossos rios e, atualmente, vem aumentando o interesse do mundo na preservação da natureza. Fatos como estes fizeram com que os cientistas criassem técnicas de modelagem computacional capazes de prever impactos do homem na natureza, porém não é fácil modelar, por exemplo, o fluxo de rios com as dimensões de um rio da Amazônia. Faz-se necessário na Amazônia, pesquisadores envolvidos em dar respostas, em caso de impactos ambientais que possam vir a destruir este patrimônio mundial.

Para descrever o escoamento de um rio, é necessário resolver as equações que descrevem o movimento de líquidos e gases, as Equações de Navier-Stokes associadas a Equação da Continuidade, que são equações diferenciais parciais não-lineares. Os modelos de autômatos celulares permitem a simulação de sistemas complexos, e sua aplicação em fluidos é conhecida como "modelo de gás de rede" (lattice gas automata), técnica computacional que será utilizada neste trabalho para modelar o escoamento de um fluido através de barreiras.

O modelo de gás de rede é uma abstração, em escala microscópica, de um fluido. Ele baseia-se na idéia de que, as leis físicas fundamentais de conservação e simetrias associadas aos fluidos em nível microscópico forem reproduzidas, pode-se modelar, corretamente, o comportamento dos mesmos em nível macroscópico. Neste modelo, as partículas ocupam uma rede, possuem velocidades discretas e evoluem segundo regras pré-estabelecidas que devem obedecer as leis físicas; neste trabalho a rede é bidimensional de células hexagonais, pois são elas que melhor descrevem o comportamento dos fluidos.

Neste trabalho simulamos o escoamento bidimensional de um fluido, num trajeto em forma de "L", sem ou com barreira, imitando a forma dos rios da Região Norte do Brasil (ver Fig.0.1), com o objetivo de termos uma maneira de prever o comportamento dos mesmos em situações de impactos ambientais. O modelo proposto aqui é simples, porém levou a bons resultados do comportamento do fluido e que se melhorados podem ser de

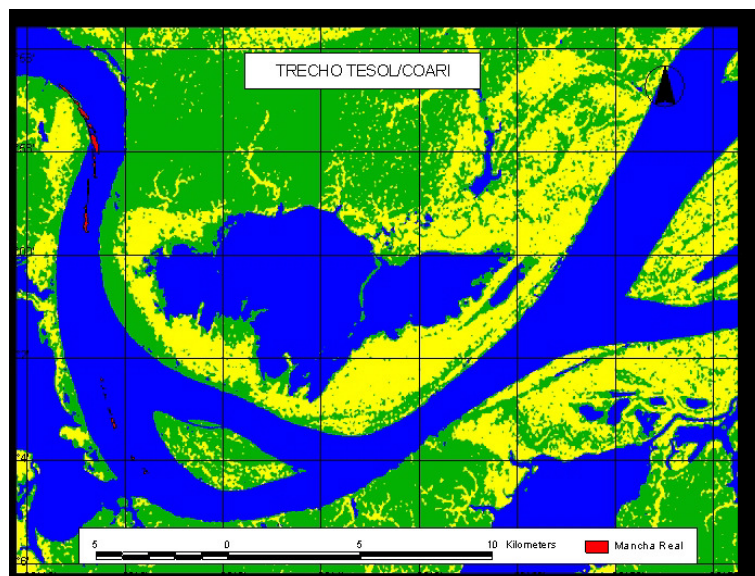


Figura 0.1: Rio Solimões, próximo a cidade de Coari/Am.

muita utilidade para o estudo de escoamento de rios. Não encontramos na literatura nenhum trabalho com um duto tendo a forma de "L", para compararmos com nossos resultados. Foi apresentado, apenas, um estudo dos fenômenos de fluidos esperado para esta forma de duto.

# Abstract

The Amazon Region keeps 70% of all fresh water of Brazil, however, the man's presence is responsible for pollution in our rivers and, nowadays, it is increasing the world interest in the nature preservation. Facts like these led scientists to create computational modelling techniques capable to preview the man's impacts in the nature. However, it is not so easy, per exemple, to model the flow of a river with Amazon's rivers dimensions. It is of crucial importance in the Amazon Region, researchers involved in giving answers in case of environmental impacts that can come to destroy this world patrimony.

To study a river flow, it is necessary to solve the equations that describe the movement of liquids and gases, the Equations of Navier-Stokes associated the Equation of the Continuity that are no-linear partial differential equations. Cellular automata models allow the simulation of complex systems, and their applications in fluids are known as "lattice gas automata", one computational technique that will be used in this work to observe the paths of a fluid through barriers.

Lattice gas model of is an abstraction, at a microscopic scale, of a fluid. It is based on the idea that if we reproduce the fundamental conservation laws and symmetries associated with fluids, at a microscopic level, then we can model, correctly, the behavior of the fluid at a macroscopic level. In this model, the particles occupy a lattice, possess discrete velocities and following deterministic rules according to the physical laws; this work uses a two-dimensional hexagonal lattice, because its symmetry is more closely related to a continuum fluid. In this work we simulated the two-dimensional fluid motion, in a "L" shape container, without or with barrier, imitating the form of the rivers of the North of Brazil (to see Fig.0.1), with the objective of obtaining a way to foresee the behavior of the rivers in situations of environmental impacts.

The model proposed here is simple, however, it led to good results of the fluid behavior and, if gotten better, can be of a lot of utility for the study of river motion. We didn't find on the literature any work with a "L" shape container for comparing with our results. It was presented, just, a study of the fluids phenomena expected for this path.

# Capítulo 1

## Introdução

Na natureza observamos muitos fenômenos complexos, como o cérebro humano ou um gás no interior de um recipiente, que por possuírem muitas variáveis, são difíceis de serem modelados através de métodos clássicos (fundamentos teóricos e experiências). Um desses fenômenos complexos é o movimento dos fluidos, que será o objeto de estudo deste trabalho.

O estudo do movimento dos fluidos é uma atividade que vem sendo desenvolvida há muitos séculos, desde os egípcios até os dias atuais. Leonard Euler é considerado um dos fundadores da hidrodinâmica, ciência que estabelece as relações entre o movimento dos fluidos e as forças que causam esse movimento. Foi ele quem primeiro deduziu as equações de movimento de fluidos, as chamadas equações de Euler. Porém, as descrições matemáticas do comportamento dos fluidos só ganharam força no século XIX, na forma das equações de Navier-Stokes, a partir dos trabalhos pioneiros dos franceses Claude Navier (1827), Simeon Poisson (1829) e do inglês George Stokes (1845). Dependendo das propriedades do fluido e do escoamento, as equações de Navier-Stokes podem ser escritas de muitas formas.

Soluções analíticas para as equações de Navier-Stokes só foram obtidas para alguns poucos casos. As dificuldades de se encontrar soluções analíticas decorre do fato de que as equações de Navier-Stokes são equações diferenciais parciais não-lineares, e a teoria

matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de soluções analíticas em regiões arbitrárias e condições de contorno gerais.

Na grande maioria dos casos, os tratamentos experimentais de fenômenos complexos, que usam uma equação diferencial parcial para descrever seus comportamentos, são satisfatórios, geralmente, por duas razões: (a) o fenômeno complexo, em estudo, nem sempre é simples de se reproduzir em laboratórios, mesmo em escala reduzida; e (b) o alto custo financeiro e o tempo da montagem experimental. Exemplo de (a) é a previsão de tempo, que trata de movimentos de ar atmosférico, pois esses deslocamentos têm influência direta no tempo. Exemplo de (b) inclui o estudo da aerodinâmica de aviões em túneis de vento de altas velocidades, que são caros de serem operados.

Com o advento do computador a partir década de 50, além do desenvolvimento teórico e experimental da dinâmica dos fluidos surgiu uma terceira alternativa: obter, pela solução numérica das equações de Navier-Stokes utilizando técnicas computacionais, o campo de velocidades que compõem o escoamento de um fluido. Problemas reais de engenharia normalmente requerem o tratamento computacional, pois, muitas vezes, essa é a forma mais prática, ou a única, de se obter os dados sobre o escoamento.

Basicamente, o usuário de dinâmica de fluidos computacional está interessado em obter as distribuições de velocidades, pressões e temperaturas na região do escoamento. Com esses dados podemos otimizar, por exemplo, um projeto de irrigação, reduzindo os custos operacionais e melhorando o desempenho.

Na década de 50, Von Neumann [2] baseando-se em estudos de Ulam desenvolveu um formalismo matemático que futuramente serviria para a modelagem desses tipos de fenômenos. Esse formalismo é conhecido como Autômato Celular, e impulsionou o desenvolvimento da ciência da complexidade [3], fenômenos como dispersão de poluentes, propagação de doenças, tráfego de veículos e outros, que possuem uma quantidade muito grande de variáveis para que possam ser descritos com eficiência, através de métodos clássicos, passaram a ser simulados, obtendo-se bons resultados.





Figura 1.1: Rio Amazonas.

Empregaremos neste trabalho o modelo de autômatos celulares para fluidos, a fim de observar o escoamento de um fluido através de dutos e verificar se os resultados obtidos coincidem com os obtidos em outras literaturas. O duto proposto por nós, pode estar livre ou possuir barreiras. A escolha da forma do caminho a ser modelado lembra os rios da Amazônia (ver Figs. 1.1 e 1.2).

O texto deste trabalho será organizado da seguinte forma. Uma análise das equações que regem o movimento dos fluidos será apresentada no Capítulo 2, onde temos como objetivo de descrever o significado dos termos das duas equações abordadas: a conservação da massa, descrita na seção 2.2, e a conservação do momento, descrita na seção 2.3, que são leis da física que devem ser satisfeitas por equações matemáticas.

No Capítulo 3, faremos um levantamento histórico sobre autômato celular desde sua criação por Neumann, na década de 50. Em seguida, definiremos e discutiremos as principais características deste método, também citando os principais trabalhos desenvolvidos utilizando autômato celular como base.

No Capítulo 4, mostraremos matematicamente a análise desenvolvida por Wolfran, em seu artigo "Cellular Automaton Fluids: Basic Theory" de 1986, um dos principais artigos



Figura 1.2: Rio Solimões.

sobre aplicação de autômatos celulares em fluidos, e e compararemos com as equações de Navier-Stokes discutidas no Capítulo 2.

No Capítulo 5, discutiremos o algoritmo do código-fonte utilizado para fazer a simulação do fluxo de um fluido, mostraremos as simulações obtidas utilizando autômato celular em diferentes percursos com ou sem barreira, alterando as dimensões das barreiras e variando a pressão. Por fim, no Capítulo 6 analisaremos se os resultados obtidos apresentam os fenômenos comuns em fluido, e apresentamos nossas conclusões sobre o trabalho.

## Capítulo 2

# Equações Básicas da Dinâmica dos Fluidos

A mecânica dos fluidos é importante em muitas áreas [4]. A biomecânica se faz presente no estudo do escoamento de sangue e do fluido cerebral; a meteorologia e a engenharia oceanográfica estão presentes no estudo dos deslocamentos das correntes do ar e das correntes marítimas. Já os engenheiros químicos devem usar os conceitos de mecânica dos fluidos para projetar diferentes tipos de equipamentos de processamento químico, tais como: craqueamento e alquilação; os engenheiros civis a utilizam para compreender o transporte de sedimentos nos rios e na erosão, a poluição do ar e da água e para projetar sistemas de tubulações, usinas de tratamento de esgotos, canais de irrigação, sistemas de controle de alagamentos, represas e estádios atléticos cobertos. Na Região Norte do Brasil, muitos ribeirinhos vivem dos recursos dos rios da região, através da pesca e da irrigação de suas plantações. O conhecimento do campo de velocidades da partícula do fluido e do transporte de poluentes nos rios servirá de prognósticos em possíveis casos de impactos ambientais.

Líquidos e gases têm em comum, graças à facilidade de deformação, que se deve à distância atômica, a propriedade de poderem se escoar ou fluir facilmente, donde surge o nome de fluidos. Para uma definição mais precisa de fluidos, é necessário classificar

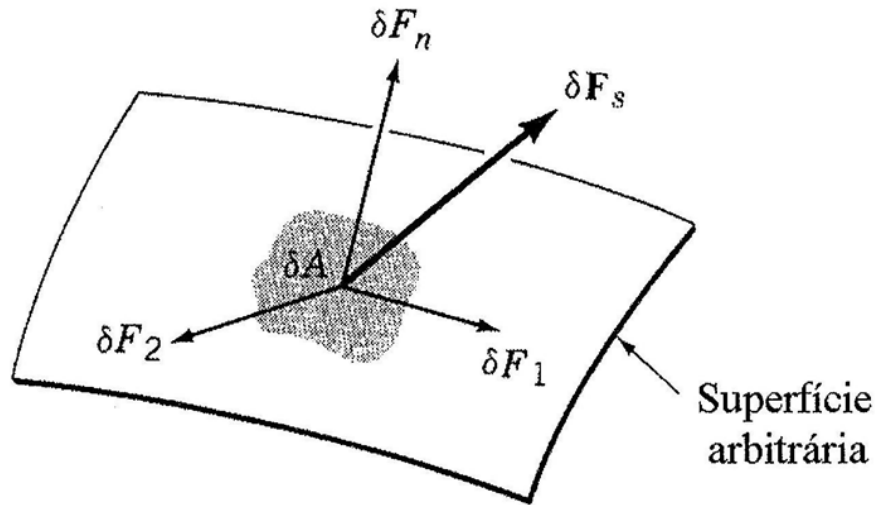


Figura 2.1: Componentes da força que atuam numa superfície diferencial arbitrária.

os diferentes tipos de forças que atuam num meio material (externo ou interno). Essas forças são, geralmente, proporcionais a sua área (ver Fig.2.1). A força por unidade de área chama-se tensão e é dividida em tensões normal e tangencial (de cisalhamento) às superfícies sobre as quais atuam.

Um fluido como a água, ao contrário de um sólido como a madeira, não pode equilibrar uma força tangencial,  $\delta F_n$ , por menor que ela seja. Portanto, os fluidos são substâncias que não resistem a tensão de cisalhamento.

Apesar da estrutura molecular dos fluidos ser importante para distinguir um fluido de outro, não é possível descrever o comportamento dos fluidos, em equilíbrio ou em movimento, a partir da dinâmica individual de suas moléculas, pois teríamos que aplicar  $10^{23}$  equações, uma para cada molécula [5]. Mais precisamente, nós caracterizamos o comportamento dos fluidos considerando os valores médios, ou macroscópicos, das quantidades de interesse. Assim, quando afirmamos que a velocidade num ponto do escoamento assume ou tem certo valor, na verdade, nós estamos indicando a velocidade média das moléculas que ocupam um pequeno volume que envolve o ponto considerado. Este vo-

lume deve ser pequeno em relação às dimensões físicas do sistema que estamos analisando mas deve ser grande quando comparado com a distância média intermolecular.

Claude Navier e George Stokes propuseram um conjunto de equações diferenciais para descrever o movimento das substâncias fluidas. Este conjunto de equações passou a ser chamado de equações de Navier-Stokes, desenvolvida originalmente por Navier com base em argumentos moleculares em 1827 [6] e por Stokes a partir do conceito de contínuo em 1845 [7]. Essas equações modelam o escoamento de fluidos compressíveis e incompressíveis, turbulentos e laminares.

As equações de Navier-Stokes descrevem matematicamente as leis físicas que regem o movimento de fluidos:

1. Conservação de massa.
2. Conservação de momento (segunda lei de Newton): a taxa de variação temporal de momento do fluido é igual à resultante das forças que atuam sobre o fluido.
3. Conservação de energia (primeira lei da termodinâmica): a taxa de variação temporal da energia é igual à soma do fluxo líquido, ou fluxo resultante, de calor para o fluido com o trabalho realizado sobre o fluido.

No nosso estudo, o fluido será considerado um contínuo de massa, no qual não existem descontinuidades. Numa escala macroscópica, a estrutura discreta da matéria e os movimentos das moléculas podem ser desprezados [8]. Neste caso, as propriedades de escoamento deste fluido podem ser descritas em termos de grandezas macroscópicas como: velocidade, pressão, densidade e temperatura. Estas grandezas macroscópicas referem-se a um elemento de volume do fluido e representam médias sobre todas as moléculas nele contidas.

Nas seções seguintes apresentaremos as equações de Navier-Stokes, que descrevem o escoamento de um fluido. Embora o escoamento não precise ser isotérmico, as variações de temperatura serão consideradas "pequenas" o suficiente para que alterações na

densidade e na viscosidade do fluido, devidas às variações de temperatura, sejam consideradas desprezíveis. Desta forma, o coeficiente de viscosidade também será considerado constante e uniforme.

## 2.1 Derivada Total

Qualquer grandeza que for usada na descrição do estado de um fluido, como por exemplo a pressão  $p$ , será uma função das coordenadas espaciais  $x$ ,  $y$  e  $z$  e do tempo  $t$ ,  $p = p(x, y, z, t)$ , isto é, haverá um valor definido da função para cada ponto no espaço e em cada instante. Embora o método de descrição adotado focalize a atenção num ponto no espaço e não numa partícula do fluido, não é possível deixar de seguir as próprias partículas do fluido, pelo menos durante pequenos intervalos de tempo  $dt$ , pois é em relação às partículas e não aos pontos do espaço que se aplicam as leis da mecânica. É preciso, entretanto, dar atenção a duas taxas de variação com o tempo de qualquer grandeza como, por exemplo,  $p$ . A taxa com que a pressão varia com o tempo num ponto fixo do espaço será igual a sua derivada parcial em relação ao tempo ( $\partial p/\partial t$ ), que é também uma função de  $x$ ,  $y$ ,  $z$  e  $t$ . A taxa de variação da pressão em relação a um ponto que se move juntamente com o fluido será dada pela seguinte derivada total [9]:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial p}{\partial z} \frac{dz}{dt}, \quad (2.1)$$

onde  $dx/dt$ ,  $dy/dt$  e  $dz/dt$  são as componentes da velocidade  $\vec{v}$  do fluido. Podemos re-escrever a Eq.(2.1) como:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + v_x \frac{\partial p}{\partial x} + v_y \frac{\partial p}{\partial y} + v_z \frac{\partial p}{\partial z} \quad (2.2)$$

ou

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} p, \quad (2.3)$$

onde a segunda expressão é a forma reduzida da primeira, de acordo com as convenções para a utilização do símbolo do operador  $\vec{\nabla}$ , onde  $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}$ . A derivada total  $dp/dt$  é, também, uma função de  $x$ ,  $y$ ,  $z$  e  $t$ . Na realidade, esta relação é válida para as derivadas totais de qualquer grandeza, podendo-se escrever, simbolicamente, como:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}. \quad (2.4)$$

## 2.2 Equação de Conservação da Massa

A equação de conservação da massa, também denominada Equação da Continuidade, será derivada, considerando o movimento de um fluido em regime laminar [10]. Embora a massa de um elemento de volume permaneça constante, o seu volume pode variar de acordo com a pressão exercida sobre a superfície que delimita este elemento de volume. Como a densidade do elemento de volume é a razão da massa pelo volume, ou seja,  $\rho = m/V$ , esta quantidade varia devido às variações de volume.

A Equação da Continuidade é de fundamental importância para o estudo de todos os problemas relacionados ao movimento dos fluidos e a sua dedução pode ser obtida por diferentes abordagens teóricas. Conceitualmente, a Equação da Continuidade impõe a condição de conservação de massa: “a variação local da densidade no interior de um elemento de volume decorre, unicamente, da divergência ou convergência do fluxo de massa ( $\rho\vec{v}$ ) através da superfície fechada que delimita o elemento de volume”.

A descrição do movimento dos fluidos será feita especificando-se a densidade  $\rho = \rho(x, y, z, t)$  e do vetor velocidade  $\vec{v} = v(x, y, z, t)$ , no ponto  $x$ ,  $y$ , e  $z$ , e no tempo  $t$ .

Vamos considerar, agora, um elemento de volume de fluido,  $\delta V$ , admitindo que  $\delta V$  identifique um elemento de volume que se move com o fluido, ou seja, que contenha sempre as mesmas partículas do fluido. Em geral, o volume  $\delta V$  varia com o tempo e é preciso calcular esta taxa de variação. Considerando que  $\delta V$  tenha a forma de um paralelepípedo de dimensões  $\delta x$ ,  $\delta y$  e  $\delta z$ , conforme a Fig.2.2, tal que  $\delta V = \delta x\delta y\delta z$ .

A componente  $x$  da velocidade do fluido,  $v_x$ , pode ser diferente nas faces da caixa à

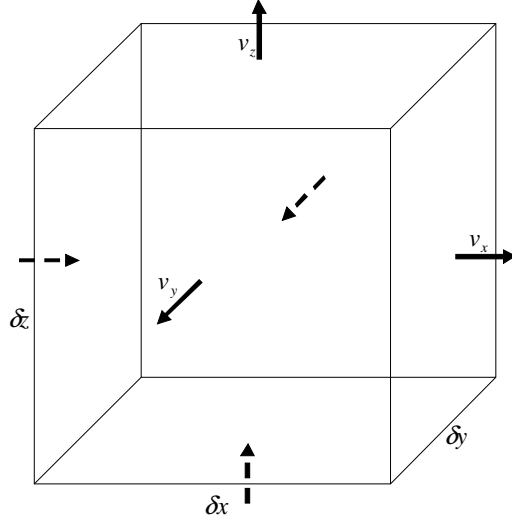


Figura 2.2: Movimento de um elemento do fluido em expansão.

esquerda e à direita. Se isto acontecer,  $\delta x$  variará com o tempo com uma taxa igual à diferença entre estas duas velocidades:

$$\frac{d}{dt}\delta x = \frac{\partial v_x}{\partial x}\delta x, \quad (2.5)$$

o mesmo ocorrendo para as componentes  $y$  e  $z$ .

A taxa de variação  $\delta V$  com o tempo será dada por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\delta V &= \delta y\delta z\frac{\partial}{\partial t}\delta x + \delta x\delta z\frac{d}{dt}\delta y + \delta x\delta y\frac{d}{dt}\delta z \\ &= \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}\right)\delta x\delta y\delta z, \end{aligned}$$

e, finalmente,

$$\frac{d}{dt}\delta V = \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}\right)\delta V. \quad (2.6)$$

Se o fluido for incompressível, então o volume de cada elemento deve permanecer constante:

$$\frac{d}{dt}\delta V = 0 \quad (2.7)$$



e, conseqüentemente, de acordo com a Eq.(2.6),

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.8)$$

Na realidade, nenhum fluido é absolutamente incompressível, mas em muitos casos, a compressibilidade pode ser desprezada, como acontece para muitos gases.

O elemento de massa contido em  $\delta V$  é dado por

$$\delta m = \rho \delta V, \quad (2.9)$$

e permanecerá constante, mesmo que o volume e a densidade não permaneçam, ou seja,

$$\frac{d}{dt} \delta m = \frac{d}{dt} (\rho \delta V) = 0, \quad (2.10)$$

e utilizando a Eq.(2.6), obtém-se

$$\delta V \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{d\delta V}{dt} = \delta V \frac{d\rho}{dt} + \rho (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \delta V = 0, \quad (2.11)$$

que ao ser dividida por  $\delta V$  se reduz a

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.12)$$

Utilizando-se a Eq.(2.4), pode-se re-escrever esta equação em termos das derivadas parciais em relação a um ponto fixo no espaço:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0, \quad (2.13)$$

e combinando os dois últimos termos de Eq.(2.13) obtemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}), \quad (2.14)$$

onde o vetor  $\rho \vec{v}$  é denominado fluxo de massa.

Esta é a Equação da Continuidade para o movimento de matéria contínua, que garante, essencialmente, que a matéria não é criada nem destruída; a massa  $\delta m$ , em qualquer volume  $\delta V$ , que se mova com o fluido, permanece constante, ou seja:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Taxa de aumento da massa} \\ \text{por unidade de volume} \\ \text{dentro do volume de controle} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Taxa líquida de saída de massa} \\ \text{por unidade de volume} \\ \text{da superfície de controle} \end{array} \right].$$

## 2.3 Equação de Conservação do Momento

Para se obter a equação de conservação do momento linear, partimos da segunda lei de Newton [10]:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt} \Bigg|_{\text{sistema}}, \quad (2.15)$$

onde  $\vec{F}$  é a força resultante que atua na massa fluida e  $\vec{P}$  é a quantidade de movimento linear do sistema, definida por

$$\vec{P}_{\text{sistema}} = \int \vec{v} \delta m. \quad (2.16)$$

Os agentes responsáveis pela variação do momento linear de um sistema físico são as forças que agem sobre o mesmo.

Para um elemento de massa  $\delta m$  constante, a segunda lei de Newton pode ser escrita como:

$$\delta \vec{F} = \delta m \vec{a}, \quad (2.17)$$

onde a aceleração total é dada por:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}. \quad (2.18)$$

ou

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = v_x \frac{\partial \vec{v}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \vec{v}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \vec{v}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}. \quad (2.19)$$

Substituindo este resultado na Eq.(2.17) e utilizando a Eq. (2.9) obtemos:

$$d\vec{F} = \delta m \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \delta V \left[ v_x \frac{\partial \vec{v}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \vec{v}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \vec{v}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \right]. \quad (2.20)$$

Existem dois tipos de forças que atuam em um elemento fluido: as forças de superfície,  $\delta \vec{F}_S$ , que atuam na superfície elemento e são o resultado da interação do elemento com o meio, e as forças de campo,  $\vec{f}_e \delta V$ , que são forças distribuídas que atuam no meio fluido.

A força superficial, geralmente, está inclinada em relação a superfície, conforme a Fig. 2.1. Vamos decompô-la nas componentes  $\delta F_n$ ,  $\delta F_1$  e  $\delta F_2$ , onde  $\delta F_n$  é normal ao plano que contém  $\delta A$  e  $\delta F_1$  e  $\delta F_2$  são paralelos ao plano considerado e, mutuamente, ortogonais. Definimos a tensão normal por:

$$\sigma_n = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_n}{\delta A}, \quad (2.21)$$

e as tensões tangenciais (ou de cisalhamento) como:

$$\tau_1 = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_1}{\delta A} \quad (2.22)$$

e

$$\tau_2 = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_2}{\delta A}. \quad (2.23)$$

Portanto, a intensidade da força por unidade de área que atua num ponto do corpo fluido pode ser caracterizada por uma tensão normal e por duas tensões de cisalhamento. Se a orientação da área estiver especificada, como na Fig.2.3, podemos escrever:

$$\lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta \vec{F}_S}{\delta A} = \sigma_{nn} \hat{n} + \tau_{nt_1} \hat{t}_1 + \tau_{nt_2} \hat{t}_2,$$

onde  $\hat{n}$ ,  $\hat{t}_1$  e  $\hat{t}_2$  são os vetores unitários que caracterizam as direções dos eixos ortogonais de um sistema tridimensional.

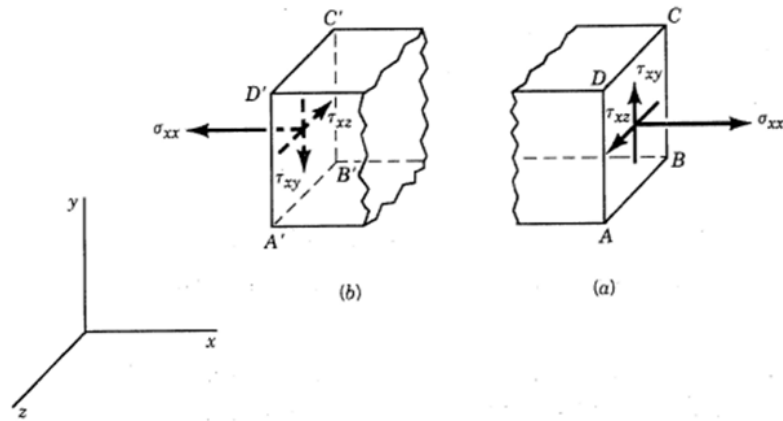


Figura 2.3: Notação para as tensões.

Na Fig.2.3 consideramos as tensões que atuam nos planos paralelos aos planos coordenados do sistema de coordenadas cartesianas. A tensão normal é escrita como  $\sigma_{xx}$  e as tensões de cisalhamento são escritas como  $\tau_{xy}$  e  $\tau_{xz}$  no plano ABCD (que é paralelo ao plano  $y$ - $z$ ). Estamos utilizando dois subíndices para identificar uma tensão que atua na superfície. O primeiro subíndice indica a direção da normal ao plano em que a tensão atua e o segundo subíndice indica a direção em que atua a tensão. Assim, a tensão normal apresenta índices repetidos enquanto que os índices das tensões de cisalhamento são sempre diferentes.

Neste ponto torna-se necessário estabelecer uma convenção de sinais para as tensões. Iremos adotar que uma tensão é positiva quando aponta para o sentido positivo do sistema de coordenadas e quando a área, onde atua a tensão, apresenta normal positiva.

Normalmente, as tensões que atuam no fluido variam de ponto para ponto do campo de escoamento. Assim, nós vamos expressar as forças que atuam nas várias faces do elemento em função das tensões que atuam no seu centro e dos gradientes das tensões nas direções do sistema de coordenadas. A Fig. 2.4 indica apenas as tensões que atuam na direção  $x$  e isto foi feito para simplificar a apresentação. O somatório de todas as

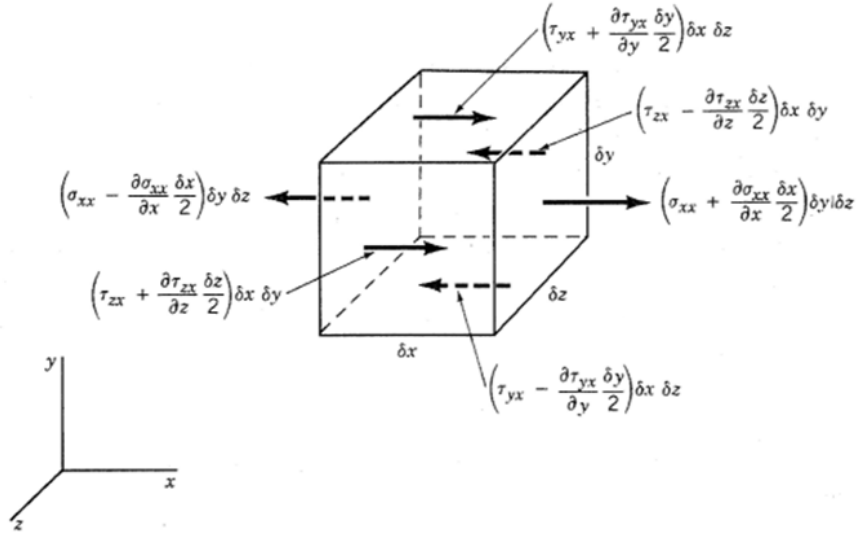


Figura 2.4: Componentes na direção  $x$  das forças superficiais que atuam num elemento fluido.

forças superficiais na direção  $x$  leva a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \delta F_{S_x} = & \left( \sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \frac{\delta x}{2} \right) \delta y \delta z - \left( \sigma_{xx} - \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \frac{\delta x}{2} \right) \delta y \delta z \\ & + \left( \tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{\delta y}{2} \right) \delta x \delta z - \left( \tau_{yx} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{\delta y}{2} \right) \delta x \delta z \\ & + \left( \tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{\delta z}{2} \right) \delta x \delta y - \left( \tau_{zx} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{\delta z}{2} \right) \delta x \delta y, \end{aligned}$$

que simplificado

$$\delta F_{S_x} = \left( \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) \delta V, \quad (2.24)$$

com expressões similares para as componentes  $y$  e  $z$ .

As forças de natureza externa ao fluido,  $\vec{f}_e \delta V$ , resultam da presença de forças campo, como por exemplo, força gravitacional ou força eletromagnética, que são forças aplicadas ao fluido por outros agentes que não estejam em contato com ele. Portanto, a componente

$x$  das forças que atuam sobre a massa fluida  $\delta m$ , dada pela Eq. (2.20), é

$$\rho \left( v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial t} \right) = \left( \vec{f}_e \right)_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}, \quad (2.25)$$

onde  $\left( \vec{f}_e \right)_x$  é a componente  $x$  da densidade volumétrica das forças de campo.

Para fluidos newtonianos, fluidos que apresentam uma relação linear entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação por cisalhamento, com constante de proporcionalidade entre eles ([11], [12] e [13]),  $\mu$ , denominada viscosidade dinâmica do fluido, obtemos

$$\sigma_{xx} = -p + 2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (2.26)$$

$$\sigma_{yy} = -p + 2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (2.27)$$

$$\sigma_{zz} = -p + 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (2.28)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \quad (2.29)$$

$$\tau_{zy} = \tau_{yz} = \mu \left( \frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \quad (2.30)$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left( \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \quad (2.31)$$

onde  $p$  é a pressão definida como o negativo da média das três tensões normais, ou seja,

$$-p = \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}). \quad (2.32)$$

Substituindo as expressões acima na Eq.(2.25), obtemos

$$\rho \left( v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial t} \right) = f_e - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right), \quad (2.33)$$

e similares equações para as componentes  $y$  e  $z$ .

Em notação vetorial, as equações de Navier-Stokes para fluidos compressíveis com

viscosidade constante são dadas por:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = \vec{f}_e - \vec{\nabla} p + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \frac{\mu}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (2.34)$$

O segundo termo do lado esquerdo da Eq. (2.34) é o termo convectivo, o primeiro e o segundo termo do lado direito são, respectivamente, forças externas e gradiente de pressão.

### 2.3.1 Equação Diferencial de Euler

Um caso particular muito importante das equações de Navier-Stokes é aquele idealizado sem viscosidade, o que significa ausência de tensões de cisalhamento. As únicas forças de superfície no elemento fluido são as originadas por tensões normais, no caso, representadas pela pressão  $p$ . Tal equação foi proposta por Euler em 1755.

Portanto, nestas condições as equações de Navier-Stokes reduzem-se às equações de Euler:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = \vec{f}_e - \vec{\nabla} p. \quad (2.35)$$

# Capítulo 3

## Autômato Celular

Parte da beleza da física é que ela nos permite, em muitos casos, descrever fenômenos naturais com uma pequena quantidade de leis simples. Fascina-nos mais ainda pensar como poucas leis podem reproduzir uma grande quantidade de comportamentos observados na natureza. Neste Capítulo iremos apresentar a história, os conceitos e definições básicas do modelo conhecido como autômato celular.

Os autômatos celulares são idealizações matemática de sistemas dinâmicos, discretos no tempo, no espaço e em suas variáveis. Eles possuem uma rede discreta de pontos (sítios ou células), a qual atribuímos uma variável discreta (autômato) a cada sítio. A evolução temporal dos diferentes estados do autômato são determinados por regras locais (ou não) bem definidas. Por exemplo, uma variável de dois estados pode descrever uma célula morta ou viva, ativada ou desativada, amarela ou vermelha. Cada passo de tempo corresponde a atualização dos estados de todas as células de acordo com regras pré-estabelecidas.

### 3.1 Desenvolvimento Histórico

Os autômatos celulares foram propostos inicialmente por von Neumann, na década de 50, como um modelo formal de auto-reprodução de organismos. Sua idéia era encon-



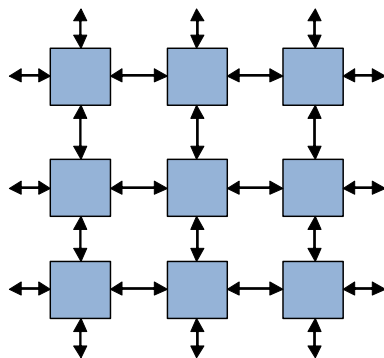


Figura 3.1: Autômato celular bidimensional segundo Von Neumann.

trar regras simples de interações espaciais e evolução temporal, que dessem origem a comportamentos complexos.

Von Neumann seguindo sugestões de Stanislaw Ulam, propôs um universo consistindo de uma malha bidimensional constituída de máquinas de estado finito, chamadas células, interconectadas localmente umas às outras. A cada uma dessas células estaria associado um estado, que seria atualizado a cada instante de acordo com uma regra que considera o estado da própria célula e os estados das células vizinhas. Tal atualização ocorreria simultaneamente em todas as células. O primeiro trabalho de Von Neumann era composto por 200.000 células numa rede bidimensional com células vizinhas ortogonais (ver Fig.3.1), onde a cada célula associou uma variável discreta que podia representar até 29 estados (cores).

Em 1983, Stephen Wolfram publicou o primeiro de uma série de trabalhos sobre autômatos celulares como modelos matemáticos para sistemas estatísticos de auto-organização. Ele utilizou o modelo de autômato unidimensional composto por uma cadeia infinita de células, onde cada célula poderia assumir 2 estados, 0 ou 1, como mostra a Fig.3.2, e regras de evolução que consideram apenas a própria célula e seus dois vizinhos mais próximos.

A década de 80 representa um dos mais importantes períodos da história dos autômatos celulares, especialmente devido aos trabalhos de Wolfram, o qual foi responsável

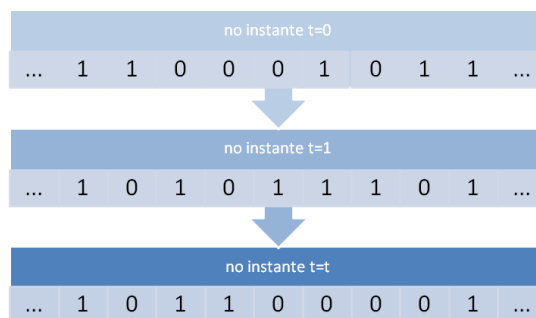


Figura 3.2: Evolução do autômato celular unidimensional

por desenvolver uma extensa análise através de simulações sobre os padrões espaço-temporais da evolução de autômatos celulares. Neste período, os novos trabalhos sobre autômatos celulares passavam a considerá-los como modelos de sistemas complexos, no sentido que, regras bastante simples poderiam originar padrões extremamente complexos. A simplicidade matemática do modelo de autômatos celulares era vista como uma vantagem bastante significativa para modelagem, pois não havia a necessidade da utilização de sistemas de equações diferenciais.

No livro *The Lifebox, The Seashell and The Soul*, publicado 2005, o Dr. Rudy Rucker expandiu as teorias de Wolfram para uma teoria de automação universal, no qual usa os autômatos celulares como um modelo para explicar como regras simples podem gerar resultados complexos. Segundo esta teoria, tudo que existe no universo (o tempo meteorológico, a forma das folhas das árvores ou dos continentes, o movimento das estrelas, os processos da mente, etc) tem por base algoritmos simples capazes de gerar a complexidade que vemos nos mundos da física, da biologia, da sociedade, da cultura e até da psicologia.

Além do interesse por aplicações de autômatos celulares à computação e à biologia, nas últimas três décadas observa-se também bastante interesse na aplicação de autômatos celulares à física. Em particular, foram desenvolvidos modelos baseados em autômatos celulares para fluidos, como por exemplo o "*Lattice Gas Automata*" (LGA), desenvolvido

em 1986, por U. Frisch, B. Hasslacher e Y. Pomeau [14], modelos eletromagnéticos, como o "*Ising Spin Models*", modelos para fenômenos de difusão e técnicas de processamento de imagens, como detecção de bordas.

## 3.2 Definição

A descrição mais simples de um autômato celular é a de um vetor com dimensão  $d$  contituído de  $n$  células. O tempo é discreto e, em cada passo de tempo, cada célula assume um estado dentre um conjunto finito de estados possíveis. As células mudam seus estados a cada intervalo de tempo e o novo estado é completamente determinado pelo estado atual da célula e pelos estados das células vizinhas. A função que determina o novo estado da célula é chamada de regra de atualização, podendo ser local ou não. A coleção de estados celulares em um instante de tempo é chamada de uma configuração ou estado global do autômato celular e descreve o estágio de evolução do autômato. No instante  $t = 0$ , o autômato celular está em uma configuração inicial e a partir desse ponto prossegue de acordo com a regra local.

O autômato celular, é uma ferramenta matemática e possui quatro propriedades importantes, que são [15]:

- **Discretização:** espaço, tempo e variáveis discretas;
- **Atualização:** paralela (todas as células ao mesmo tempo) ou sequencial (a cada evolução da célula em um  $\Delta t$  diferente);
- **Regras:** locais ou não;
- **Homogeneidade:** regras determinística ou estocástica.

Um autômato celular é uma quádrupla  $A = (L; S; N; f)$ , onde  $L$  é um conjunto de sítios,  $S$  é um conjunto finito de valores dos sítios ou estados,  $N : L \rightarrow L^k$  é uma aplicação que define uma vizinhança de cada sítio  $n$  como uma coleção de  $k$  sítios e

$f : S^k \rightarrow S$  é uma função de evolução ou regra de atualização de  $A$ . Esta regra de atualização determina a dinâmica global do autômato celular. Em um dado instante de tempo, a configuração do autômato é o conjunto de estados de todas as células.

Os autômatos celulares são constituídos por dois grupos: o primeiro é composto pelos autômatos celulares estáticos, enquanto o segundo grupo é formado pelos autômatos celulares dinâmicos, sendo este último o que usaremos pela suas amplas aplicações em modelagem de sistemas da natureza.

Uma interessante notação para as regras dos autômatos celulares foi estabelecida por Wolfram. Esta nomenclatura pode ser exemplificada como:

$$\begin{array}{rcccccccc} t : & 111 & 110 & 101 & 100 & 011 & 010 & 001 & 000 \\ \hline t + 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array}$$

A linha de cima mostra  $2^3 = 8$  possíveis combinações de três sítios. As variáveis de cada sítio podem ter valores 0 ou 1. A linha de baixo dá o valor do sítio central no próximo intervalo de tempo. Esta regra é conhecida em notação binária como 01011010, regra de módulo 2 ou regra 90. Note que, 90 é o equivalente na base decimal do número binário 01011010, isto é,  $90 = 2^6 + 2^4 + 2^3 + 2^1$ . Essa regra é aplicada para o caso particular de autômatos unidimensionais, onde  $S = \{0, 1\}$  e  $k = 3$ , podendo ser estendida para casos mais gerais.

Uma consequência do resultado encontrado por Wolfram é o problema, conhecido como decidability, que se origina da existência do predecessor para um autômato celular unidimensional, isto é, o problema de determinar se para uma dada configuração  $X$  existe uma configuração  $Y$ , tal que  $Y$  evolui para  $X$  em um instante de tempo. Este fato conduz a um estudo mais formal da complexidade computacional de autômatos celulares.

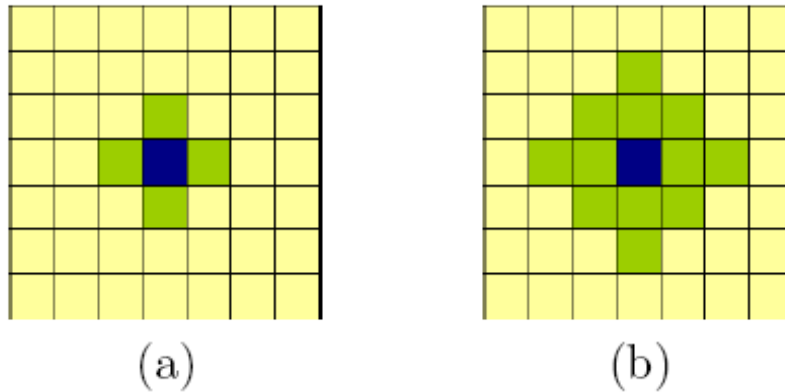


Figura 3.3: Vizinhança von Neumann (a)-Raio 1 e (b)-Raio 2.

### 3.3 Vizinhanças

Os sítios, ou células, mudam seus estados sincronizadamente a cada passo discreto de tempo. Como nota-se na definição da regra de atualização, o próximo estado de cada sítio depende do seu estado corrente, do estado dos sítios vizinhos e da regra de atualização. A vizinhança de um sítio pode ser constituída apenas pelos sítios mais próximos da mesma.

Vizinhanças comumente usadas em autômatos celulares são a vizinhança de von Neumann, a vizinhança de von Neumann de raio  $r$  da célula  $\vec{x}^0$  é definida por

$$N^v(\vec{x}^0) = \{\vec{x} : \|\vec{x} - \vec{x}^0\| \leq r\}$$

onde  $\|\cdot\|$  é a norma da soma. Em particular, quando considerados autômatos celulares bidimensionais temos,

$$N^v(x^0, y^0) = \{(x, y) : |x - x^0| + |y - y^0| \leq r\}.$$

Na Fig.3.3 representamos a vizinhança de von Neumann, (a) para  $r = 1$  e (b) para  $r = 2$ .

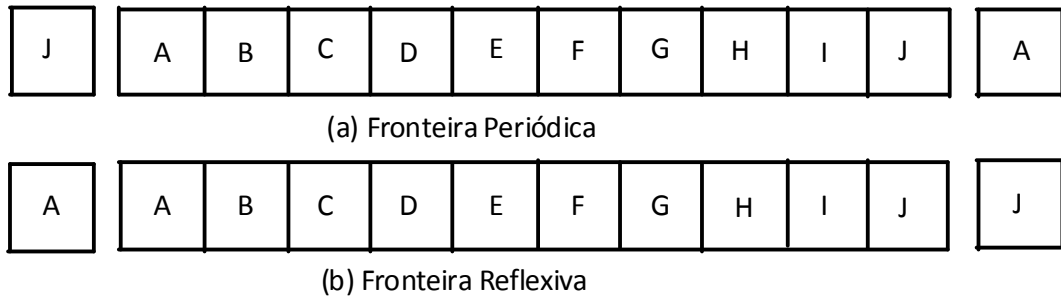


Figura 3.4: Condições de fronteira.

### 3.4 Condições de Fronteira

Ao se tratar autômatos celulares finitos é preciso estabelecer condições de fronteira. Entre as diversas possibilidades, as mais comuns são as condições de fronteira periódica e reflexiva. A condição de fronteira periódica é obtida estendendo-se a malha periodicamente, como exemplificado na Fig.3.4(a) para autômatos unidimensionais. A evolução de um autômato celular infinito com condição de fronteira periódica é equivalente a evolução de um autômato celular infinito com condição inicial periódica. Fronteira periódica é uma técnica importante por permitir a remoção de forças não realista que possam aparecer no modelo por contas das bordas do sistema.

A condição de fronteira reflexiva, mostrada na Fig.3.4 (b) para autômatos de dimensão 1, é adequada para simular sistemas difusivos. Estas condições de fronteiras podem ser combinadas, como na simulação de um canal longo, onde pode-se usar fronteira pe-riódica na horizontal e fronteira reflexiva na vertical .

Outras possibilidades podem ainda ser consideradas. Entre elas, podemos citar uma técnica que estende a malha, a cada passo de tempo, à medida que a estrutura do autômato tende a atingir a "parede" do sistema. A desvantagem dessa técnica é que em muitos casos a estrutura do autômato pode crescer muito rapidamente, ocasionando um crescimento elevado do custo computacional. Outra possibilidade é escolher regras específicas para as fronteira, onde os sítios têm menos vizinhos. Neste caso, podem

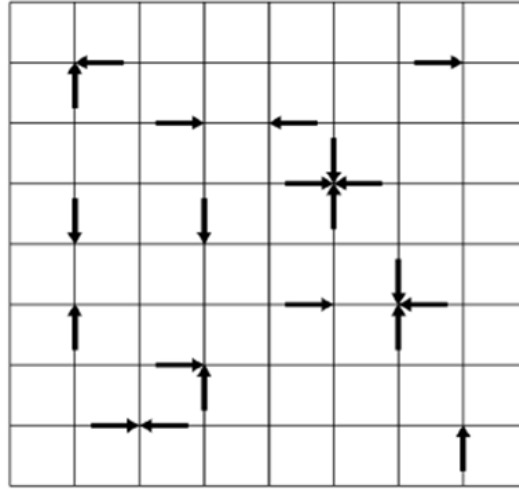


Figura 3.5: HPP: Configuração mostrando partículas microscópicas distribuídas em uma malha retangular.

ocorrer muitos tipos especiais de vizinhanças na fronteira, o que é uma desvantagem do método.

### 3.5 Modelo HPP

O autômato celular HPP é definido em uma malha retangular bidimensional. Partículas podem mover-se ao longo das direções do reticulado (nó da malha), ou seja, das arestas da malha (Fig.3.5). Dado um sítio do reticulado, pode haver no máximo uma partícula incidindo em uma determinada direção de movimento, em um determinado instante de tempo. A esta imposição, dá-se o nome de Princípio de Exclusão. Dessa forma, quatro bits de informação para cada nó são suficientes para se descrever o sistema durante sua evolução.

A regra do HPP descrevendo a evolução de um estado de uma célula consiste de duas etapas: colisão e movimento (ou propagação). A fase de colisão descreve como partículas

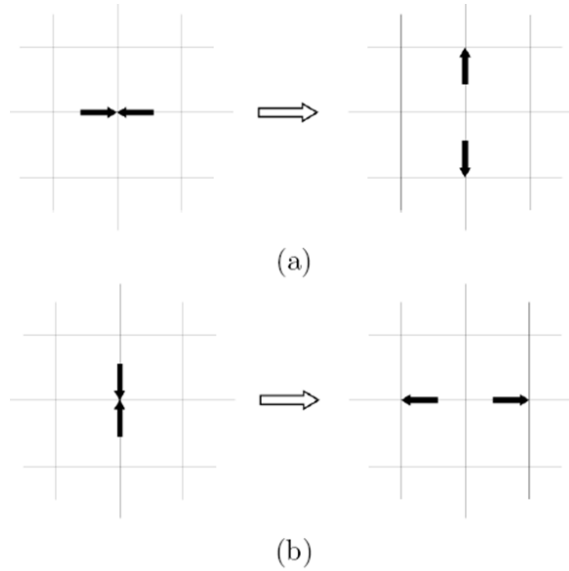


Figura 3.6: Possíveis casos de colisão entre duas partículas.

entrando no mesmo nó irão interagir umas com as outras e como a trajetória de tais partículas será afetada. Assim, a fase de colisão equivale a "rearranjar" as partículas em diferentes direções, assegurando que o princípio de exclusão será satisfeito, uma vez que esse princípio tenha sido obdecido no instante  $t = 0$ .

Durante a fase de propagação, as partículas movem-se para o sítio vizinho mais próximo, na direção correspondente a sua direção de movimento.

A Figura 3.6 ilustra os casos possíveis de colisão entre partículas no modelo HPP. Seguindo a representação booleana das partículas em cada sítio, a regra para a colisão entre duas partículas viajando em direções opostas é partículas no reticulado, podemos facilmente perceber que o princípio de exclusão é satisfeito.

A regra do HPP captura outro ingrediente importante da natureza microscópica de uma interação real: invariância sob reversão de tempo (reversibilidade). Se em um determinado instante as direções de movimento de todas as partículas forem revertidas, o sistema recuperará toda a sua história. Como a dinâmica de autômatos celulares determinísticos é exata e o HPP é determinístico, isso nos permite demonstrar que as



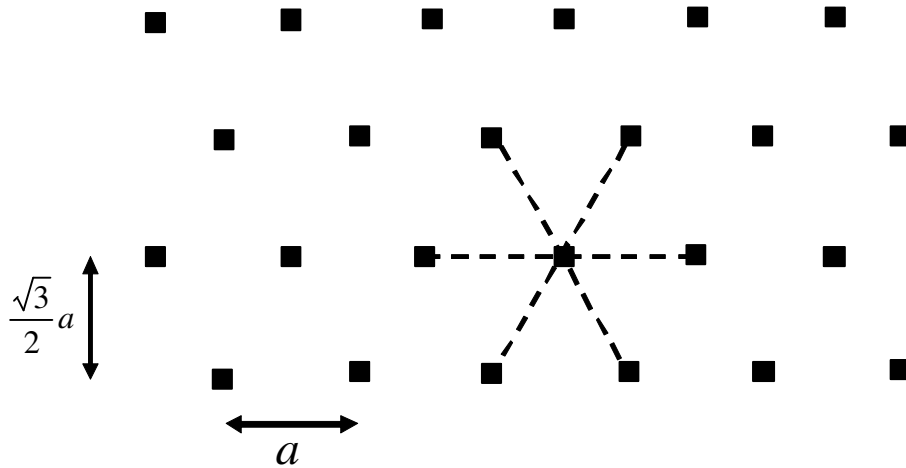


Figura 3.7: Cada partícula tem seis vizinhos em uma rede hexagonal.

propriedades físicas do sistema retomarão ao seu estado inicial quando todas as partículas reverterem suas velocidades. Esta propriedade limita a capacidade do modelo para descrever um fluido real, uma vez que nesta situação temos a presença de viscosidade. Outras limitações do HPP estão relacionadas a invariantes associados ao reticulado adotado. Uma forma de tratar estes problema, mantendo a filosofia de modelagem via LGA é dada pelo modelo FHP.

### 3.6 Modelo FHP

Em 1986, Frisch, Hasslacher e Pomeau (FHP) desenvolveram o modelo de fluido bidimensional. Mostraremos no próximo Capítulo como uma dinâmica microscópica discreta leva ao comportamento macroscópico da hidrodinâmica.

O modelo FHP consiste de uma rede hexagonal, onde serão necessários 6 bits de informação em cada sítio para descrever o sistema durante sua evolução. A Fig.3.7 representa esta rede, que tem a distância " $a$ " entre os sítios, na horizontal e distância  $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ , na vertical.

O modelo FHP é uma abstração, em uma escala microscópica, de um fluido. Ela

supostamente contém todas as características importante de um fluido real. É bem conhecido que a Equação da Continuidade e as Equações de Navier-Stokes expressam a conservação de massa e momento em um fluido. A natureza detalhada das interações microscópicas não afetam a forma destas equações, nelas aparecem apenas os valores de coeficientes, tais com a viscosidade. No entanto, os ingredientes básicos, que devem ser incluídos na microdinâmica do modelo FHP, são as conservações das partículas e momento após a atualização.

Como no caso do HPP, a microdinâmica da FHP é dada em termos das variáveis Booleanas, descrevendo os números de ocupação em cada sítio da rede em cada intervalo de tempo (i.e., a presença ou ausência de uma partícula fluida). As partículas no modelo FHP movem-se em intervalos de tempo discreto, com uma velocidade de módulo constante, apontando ao longo de uma das seis direções da rede. A dinâmica é, tal que, apenas uma partícula entra no mesmo sítio, no mesmo tempo, com a mesma velocidade. Esta restrição é o Princípio de Exclusão; isto assegura que as seis variáveis booleanas, em cada sítio da rede, são suficiente para representar a microdinâmica.

Na ausência de colisões, as partículas moveram-se em linhas retas ao longo das direções especificadas por seus vetores velocidades. O módulo do vetor é tal que, em cada intervalo de tempo, cada partícula viaja um espaçamento da rede e atinge um sítio do vizinho mais próximo.

### **3.6.1 Regras de colisão do modelo FHP**

Interações ocorrem quando as partículas entram no mesmo sítio no mesmo intervalo de tempo e resultam em uma nova distribuição local das velocidades das partículas. Com o objetivo de conservar o número de partículas e o momento durante cada interação, somente algumas configurações levam a colisões não triviais (i.e., a colisão em que a direção do movimento é alterada).

A Fig.3.8 representa as regras de colisão adotadas neste trabalho. Essas regras são determinísticas com somente um conjunto possível de velocidades após a colisão para

cada conjunto possível de velocidades antes da colisão.

### 3.7 Aplicações

O modelo de autômatos celulares possui aplicações nos mais diversos campos, e serve para descrever vários sistemas dinâmicos, pois podemos reproduzir padrões complexos com regras simples, entre eles podemos citar:

- modelagem de sistemas físicos, biológicos, etc;
- geração de padrões gráficos; (ver Figura 3.9).
- processamento de imagens digitais;
- simulação de processos de cristalização;
- simulação e estudo do crescimento de grandes centros urbanos;
- ferramentas alternativas ao uso de equações diferenciais;
- simulação de propagação de incêndios em florestas;
- simulação do comportamento de gases, entre outros.

A simulação do comportamento do fluido é o nosso objeto de estudo, pois queremos reproduzir o escoamento de rios, e na Região Amazônica temos uma grande quantidade de rios, (ver a Fig.3.10). A dispersão de poluentes nas águas, ou seja, nos rios e lagos da Amazônia, prejudicam a pesca e tornam a água imprópria para consumo ou para irrigação das plantações. É importante prognosticar os danos que podem causar a dispersão de poluentes em nossos rios. Este trabalho se propõe a utilizar um modelo bidimensional de autômatos celulares com células hexagonais, onde podemos ter até 6 partículas por sítio, e até  $2^6$  estados possíveis em cada célula, e descrever o escoamento de um fluido.

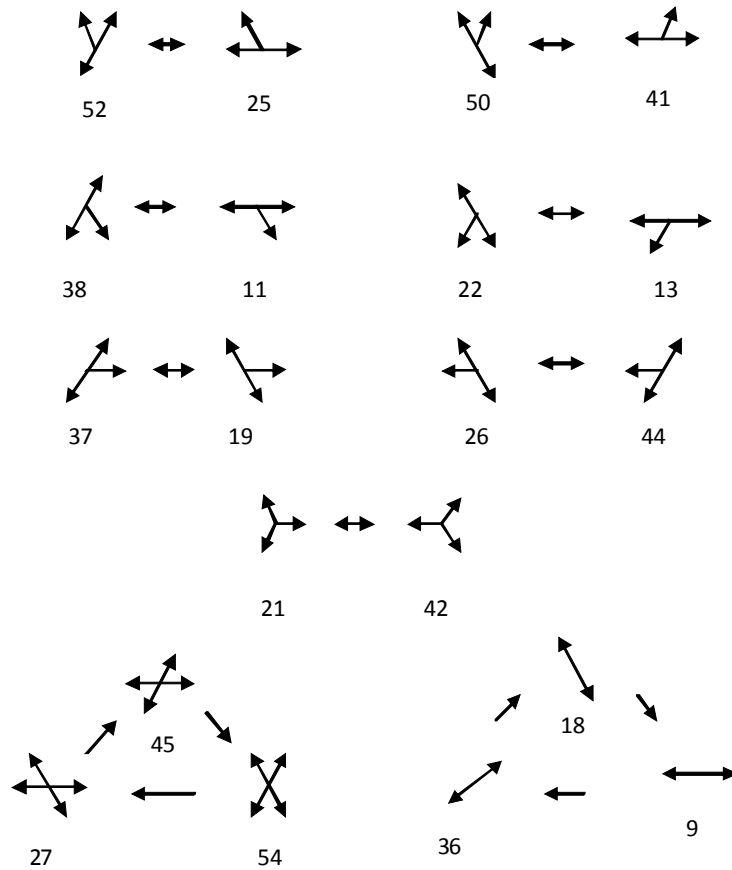


Figura 3.8: Exemplos de regras de colisão para uma rede hexagonal. A regra para configurações que não estão mostradas é que a velocidade não muda após a colisão. O número abaixo representa a maneira como as velocidades no sítio da rede são codificadas. O símbolo  $\leftrightarrow$  representa que a regra é aplicada tanto da direita para a esquerda como vice-versa.

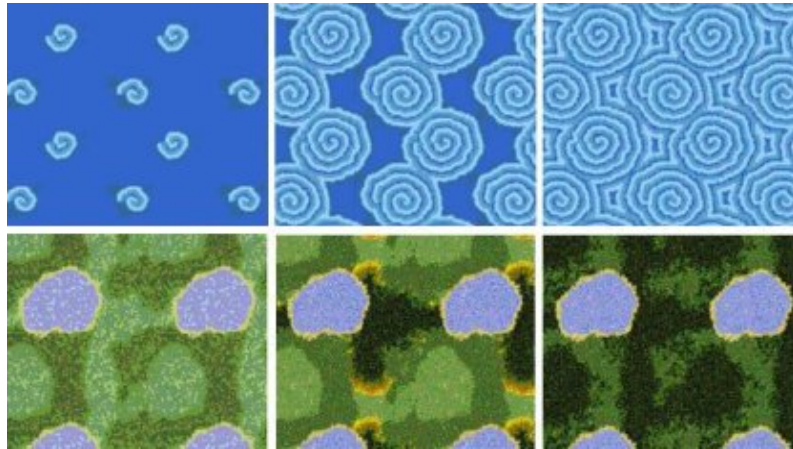


Figura 3.9: Padrões gráficos gerados por um autômatos celulares



Figura 3.10: O rio Solimões, que recebe este nome entre a fronteira entre do Peru e a cidade de Manaus, onde passa a se chamar rio Amazonas.

# Capítulo 4

## Modelo de Gás de Rede

A simulação de um fluido utilizando-se a equação diferencial de Navier-Stokes, que é não-linear, torna necessário o emprego de métodos numéricos sofisticados para descrevê-lo.

Os modelos de autômatos celulares que descrevem fluidos são chamados de modelos de "gás de rede", e são baseados na idéia da lei de conservação de massa, momento e energia de um fluido. Neste Capítulo será introduzido o modelo de gás de rede, seguindo a derivação de Wolfram [17], apresentada, primeiramente, em 1986, por U. Frisch, B. Hasslacher e Y. Pomeau [14].

### 4.1 Princípios Básicos

Os modelos de "gás de rede" (lattice gas) pertencem a classe de autômatos celulares, e são usados para reproduzir sistemas fluidos. Como autômatos celulares, estes modelos compreendem uma rede, onde os sítios sobre a rede podem assumir um certo número de estados diferentes. Cada sítio está conectado a seus vizinhos por elos ou ligações. No gás de rede, os vários estados são partículas com certas velocidades. A evolução (atualização) da simulação é feita em intervalos de tempo discretos. A cada atualização, o estado de um dado sítio pode ser determinado pelo seu próprio estado e pelo estado dos sítios vizinhos antes da atualização. O estado de cada sítio é puramente Booleano. Em um dado sítio,

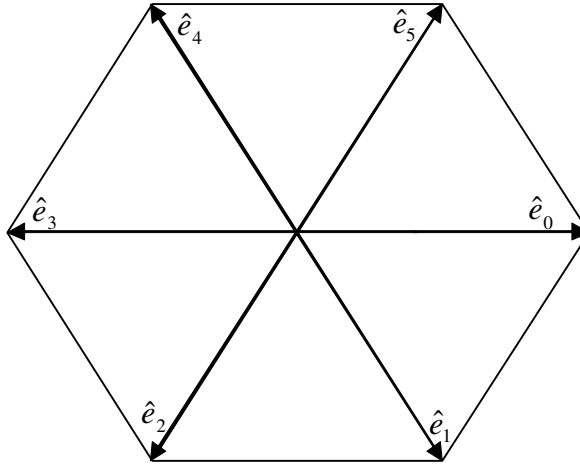


Figura 4.1: Célula hexagonal com os vetores de ligação.

existe ou não existe uma partícula com determinada velocidade.

A cada intervalo de tempo, dois processos são executados: propagação e colisão. No processo de propagação, cada partícula se moverá para o sítio vizinho determinado pela velocidade que tem. Na ausência de colisões, uma partícula com uma velocidade para cima irá, após a atualização, manter a velocidade, mas será movida para o sítio vizinho acima do sítio original. O princípio de exclusão proíbe que duas ou mais partículas viajem sobre uma ligação na mesma direção. No processo de colisão, regras de colisão são utilizadas para determinar o que acontece se mais de uma partícula chegar ao mesmo sítio. Essas regras de colisão não são necessárias para manter a conservação de massa e conservação de momento total.

O modelo apresentado neste trabalho é definido numa rede bidimensional hexagonal, onde cada sítio está conectado a seis vizinhos através de ligações que correspondem as direções dos vetores unitários (ver Fig.4.1), dados por:

$$\hat{e}_\alpha = \left[ \cos\left(\frac{2\pi\alpha}{6}\right), -\sin\left(\frac{2\pi\alpha}{6}\right) \right]$$

onde  $\alpha = 0, 1, 2, 3, 4$  e  $5$ , isto é,

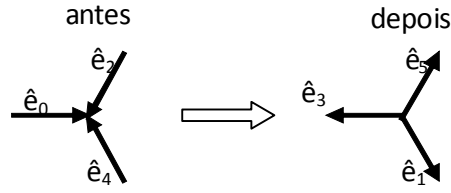


Figura 4.2: Exemplo de uma regra pré-definida.

$$\begin{aligned}
 \hat{e}_0 &= (1, 0) & \hat{e}_1 &= \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) & \hat{e}_2 &= -\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\
 \hat{e}_3 &= (-1, 0) & \hat{e}_4 &= \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) & \hat{e}_5 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

Um sítio pode ter até 6 partículas, de massas iguais a unidade com vetores velocidades unitários, apontando em uma das 6 direções,  $\hat{e}_\alpha$ . Neste modelo, todas as partículas tem a mesma energia cinética, e nenhuma energia potencial.

A configuração de partículas evoluem em uma sequência de tempos discretos,  $t = t+1$ . A cada passo no tempo, todas as partículas movem-se de um deslocamento igual a sua velocidade,  $\hat{e}_\alpha$ . Em seguida, as partículas se movem de acordo com um conjunto de regras pré-definidas, ver a Fig.4.2. Essas regras são escolhidas de modo a conservar o número e o momento total das partículas.

As regras de colisão, geralmente, são escolhidas para reproduzir processos físicos reversíveis microscopicamente. Para se obter a evolução inversa basta inverter as regras de colisão em cada sítio, porém para se obter a reversão é necessário o conhecimento completo da configuração atual. O conhecimento parcial da configuração pode tornar a evolução efetivamente irreversível. As regras utilizadas neste trabalho estão representadas na Fig.3.8.



## 4.2 Base para a Teoria Cinética

Uma aproximação comum é considerar conjuntos (ensembles) nos quais, cada possível configuração microscópica, acontece com uma probabilidade particular. A reversibilidade da dinâmica microscópica assegura que a probabilidade total para todas as configurações do conjunto precisa permanecer constante com o tempo, porém as probabilidades de configurações individuais podem mudar.

Um sistema está em “equilíbrio” se as probabilidades de suas configurações não mudam com tempo. Este é o caso de um sistema no qual todas as possíveis configurações acontecem com igual probabilidade. Num modelo de autômatos celulares com regras de colisão que conservam momento e número de partícula, os subconjuntos deste ensemble correspondem a uma configuração de equilíbrio.

Fenômenos hidrodinâmicos envolvem sistemas cujas propriedades não são uniformes no espaço e no tempo. Os ensembles de equilíbrio uniformes discutidos acima não podem prover descrições exatas de tais sistemas. No entanto, como as propriedades macroscópicas variam, em geral, lentamente, colisões devem manter equilíbrio local aproximado, que tornam as aproximações baseado em tais ensembles precisas, ou seja, é uma aproximação de equilíbrio para sistemas fora do equilíbrio.

## 4.3 Equações da Teoria Cinética

Baseado no exposto acima, consideremos uma função distribuição de uma partícula  $f_\alpha(\vec{x}, t)$ , que nos dá a probabilidade de encontrar uma partícula com velocidade  $\hat{e}_\alpha$ , na posição  $\vec{x}$  e no tempo  $t$ . Esta função distribuição pode ser alterada no tempo por dois processos diferentes: o movimento das partículas de uma célula para outra e interações entre partículas de uma mesma célula.

Na ausência de interação entre as partículas, a equação de evolução para  $f_\alpha$  é:

$$f_\alpha(\vec{X} + \hat{e}_\alpha, T + 1) = f_\alpha(\vec{X}, T), \quad (4.2)$$

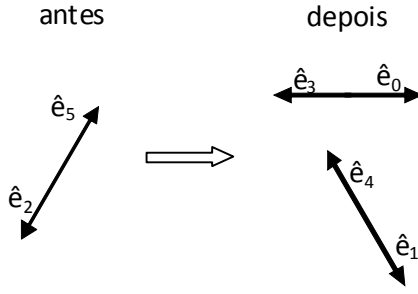


Figura 4.3: Colisões com conservação.

que expressa que uma partícula no sítio  $\vec{X}$  com velocidade  $\hat{e}_\alpha$  irá continuar na mesma direção, tal que na próxima atualização, ela irá entrar sítio adjacente na posição  $\vec{X} + \hat{e}_\alpha$  com a mesma direção de movimento. No entanto, devido a colisões, a partícula pode ser removida de sua direção original e uma outra partícula pode ser defletida na direção  $\hat{e}_\alpha$ . Por exemplo, se somente  $f_\alpha$  e  $f_{\alpha+3}$  valem 1 no sítio  $\vec{X}$ , quando uma colisão ocorre, a partícula viajando com velocidade  $\hat{e}_\alpha$  irá se mover com velocidade  $\hat{e}_{\alpha-1}$  ou com velocidade  $\hat{e}_{\alpha+1}$ . Observe a Fig.4.3, que ilustra este exemplo, ocorre conservação de momento para uma partícula com massa unitária.

Para grandes redes e intervalos de tempo longos, a posição e o tempo podem ser aproximadas por variáveis contínuas. Definindo  $\vec{x} = \delta_x \vec{X}$  e  $t = \delta_t T$ , onde  $\delta_x, \delta_t \ll 1$ , e multiplicando o termo espacial no argumento da função distribuição,  $f_\alpha$ , por  $\delta_x$  e o termo temporal no argumento da função distribuição por  $\delta_t$ , obtemos:

$$f_\alpha(\vec{x} + \hat{e}_\alpha \delta_x, t + \delta_t) - f_\alpha(\vec{x}, t) = 0 \quad (4.3)$$

### 4.3.1 Equação de Transporte de Boltzmann

Para derivar as equações de transporte macroscópico em duas dimensões, a Eq.(4.3) precisa ser convertida em uma equação de taxa de variações. Fazendo uma expansão de Taylor em  $f_\alpha(\vec{x} + \hat{e}_\alpha \delta_x, t + \delta_t)$ , em torno do ponto  $\vec{x} = x\hat{i} + y\hat{j}$ , no tempo  $t$  e com

velocidade  $\hat{e}_\alpha = (\hat{e}_\alpha)_x \hat{i} + (\hat{e}_\alpha)_y \hat{j}$ , temos:

$$\begin{aligned}
f_\alpha(\vec{x} + \hat{e}_\alpha \delta_x, t + \delta_t) &= f_\alpha(\vec{x}, t) + \delta_x \left( (\hat{e}_\alpha)_x \frac{\partial f_\alpha}{\partial x} + (\hat{e}_\alpha)_y \frac{\partial f_\alpha}{\partial y} \right) + \delta_t \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \\
&+ \frac{\delta_x^2}{2} \left( (\hat{e}_\alpha)_x^2 \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial x^2} + (\hat{e}_\alpha)_y^2 \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial y^2} + (\hat{e}_\alpha)_x (\hat{e}_\alpha)_y \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial x \partial y} \right) + \\
&+ \frac{\delta_t^2}{2} \partial_{tt} f_\alpha + \delta_x \delta_t \left( (\hat{e}_\alpha)_x \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial x \partial t} + (\hat{e}_\alpha)_y \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial y \partial t} \right) + \mathcal{O}(\delta^3), \quad (4.4)
\end{aligned}$$

onde se utilizou a notação  $\partial_t = \partial/\partial t$  e  $\partial_{tt} = \partial^2/\partial t^2$ . Re-escrevendo esta equação na forma diferencial e utilizando a Eq.(4.3),

$$\delta_t \partial_t f_\alpha + \delta_x \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) f_\alpha + \frac{1}{2} \delta_t^2 \partial_{tt} f_\alpha + \delta_x \delta_t \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) \partial_t f_\alpha + \frac{1}{2} \delta_x^2 \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right)^2 f_\alpha + \mathcal{O}(\delta^3) = 0. \quad (4.5)$$

Se todas as variações de  $f_\alpha$  forem pequenas, menores que  $\mathcal{O}(1/\delta_x, 1/\delta_t)$ , podemos considerar apenas os termos de primeira ordem em  $\delta_x$  e  $\delta_t$  e obter a Equação Básica de Transporte de Boltzmann para um gás diluído [16]:

$$\partial_t f_\alpha(\vec{x}, t) + \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) f_\alpha(\vec{x}, t) = 0. \quad (4.6)$$

Esta equação não leva em conta colisões, isto é, a função distribuição não se altera pelo movimento das partículas em um sistema espacialmente uniforme.

As colisões podem alterar a função distribuição,  $f_\alpha$ , mesmo em um sistema uniforme, e seus efeitos podem ser complicados. Porém, os detalhes das colisões são irrelevantes para a derivação das equações macroscópicas que serão feitas nesta seção. Sintetizaremos a mudança completa, devido a colisões, na função distribuição de uma partícula,  $f_\alpha$ , pelo termo de colisão,  $\Omega_\alpha$ . Nesta derivação,  $\Omega_\alpha$  será sempre um termo local e não dependerá das derivadas da função distribuição ( $\Omega_\alpha$ , em geral, depende de funções distribuição de duas partículas ou de ordens maiores). Desta forma a Equação de Transporte de

Boltzmann, Eq.(4.6) pode ser estendida para incluir os efeitos de colisão:

$$\partial_t f_\alpha + \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) f_\alpha = \Omega_\alpha. \quad (4.7)$$

## 4.4 Leis de Conservação

### 4.4.1 Equação de Conservação de Massa

As funções distribuição de uma partícula determinam quantidades macroscópicas médias, como densidade total de partículas e de densidade do momento. A densidade total de partículas  $n$  é dada por:

$$\sum_{\alpha=0}^5 f_\alpha = n, \quad (4.8)$$

e a densidade do momento  $n\vec{u}$ , onde  $\vec{u}$  é a velocidade média do fluido, é dada por:

$$\sum_{\alpha=0}^5 \hat{e}_\alpha f_\alpha = n\vec{u}. \quad (4.9)$$

A conservação dessas quantidades inferem em vínculos importantes no comportamento da função distribuição.

Em um sistema uniforme  $\vec{\nabla} f_\alpha = 0$ , a Eq.(4.7) reduz-se a:

$$\partial_t f_\alpha = \Omega_\alpha. \quad (4.10)$$

Derivando as Eqs.(4.8) e (4.9) em relação ao tempo, obtemos:

$$\sum_{\alpha} \Omega_\alpha = 0 \quad (4.11)$$

$$\sum_{\alpha} \hat{e}_\alpha \Omega_\alpha = 0 \quad (4.12)$$

Somando a Eq.(4.7) sobre todos os valores de  $\alpha$ , temos:

$$\partial_t \sum_{\alpha} f_{\alpha} + \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} f_{\alpha} = 0 \quad (4.13)$$

$$\partial_t n + \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} f_{\alpha} \right) = 0, \quad (4.14)$$

que pode ser escrito em termos de quantidades macroscópicas:

$$\partial_t n + \vec{\nabla} \cdot (n\vec{u}) = 0 \quad (4.15)$$

Esta é a Equação da Continuidade usual, que expressa a conservação de massa de um fluido. Esta equação é o primeiro exemplo de uma equação macroscópica para o comportamento médio de autômato celular para fluidos.

#### 4.4.2 Equação de Conservação de Momento Linear

Para deduzir a Equação do Momento Linear, multiplicaremos a Eq.(4.7) por  $\hat{e}_{\alpha}$  e somaremos sobre todos os valores de  $\alpha$ , i.e.,

$$\partial_t \sum_{\alpha} (\hat{e}_{\alpha} f_{\alpha}) + \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} = \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \Omega_{\alpha} \quad (4.16)$$

que utilizando as Eqs.(4.9) e (4.12), obtemos

$$\partial_t (n\vec{u}) + \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} = 0 \quad (4.17)$$

A componente  $i$  da equação acima pode ser escrita como:

$$\partial_t (nu_i) + \sum_{\alpha} \left[ (\hat{e}_{\alpha})_i \left( \sum_j (\hat{e}_{\alpha})_j \partial_j \right) f_{\alpha} \right] = 0,$$

e definindo-se a componente do tensor densidade de fluxo do momento como:

$$\Pi_{ij} = \sum_{\alpha} (\hat{e}_{\alpha})_i (\hat{e}_{\alpha})_j f_{\alpha}. \quad (4.18)$$

A Equação de Conservação de Momento Linear de primeira ordem é dada por

$$\partial_t (nu_i) + \sum_j \partial_j \Pi_{ij} = 0. \quad (4.19)$$

As Eqs.(4.15) e (4.19) foram derivadas a partir da Equação Básica de Transporte de Boltzmann, Eq.(4.7). No entanto, devemos lembrar que esta equação de transporte é aproximada, e válida até primeira ordem nos parâmetros da rede  $\delta_x$  e  $\delta_t$ . Para obtermos as correções de ordem mais elevada destas equações, devemos retornar a versão original dada pela expansão de Taylor, Eq.(4.5).

Supondo  $\delta_x = \delta_t = \delta$ , a Eq.(4.13) até segunda ordem em  $\delta$  é dada por

$$\sum_{\alpha} \left[ \left( \partial_t + \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) + \frac{1}{2} \delta \left( \partial_t + \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right)^2 \right] f_{\alpha} = 0 \quad (4.20)$$

Re-escrevendo o termo  $\mathcal{O}(\delta)$  na forma:

$$\begin{aligned} \delta \sum_{\alpha} \left( \partial_t + \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right)^2 f_{\alpha} &= \sum_{\alpha} \left[ \partial_t \partial_t f_{\alpha} + 2 \partial_t \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} + \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} \right] \\ &= \partial_t \sum_{\alpha} \left( \partial_t f_{\alpha} + \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} \right) \\ &\quad + \sum_{\alpha} \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \left( \partial_t + \left( \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \right) f_{\alpha} \\ &= \partial_t \sum_{\alpha} \left( \partial_t + \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) f_{\alpha} + \vec{\nabla} \cdot \sum_{\alpha} \left( \partial_t + \hat{e}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \hat{e}_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (4.21) \end{aligned}$$

observamos que o mesmo se anula para qualquer valor de  $f_{\alpha}$  que satisfaça, em primeira ordem, as Eqs.(4.13) e (4.17).

Os efeitos da discretização da rede, não afetam a Equação da Continuidade, Eq.(4.15), pelo menos até correções de segunda ordem em  $\delta$ . No entanto, correções em segunda or-

dem são necessárias na Equação do Momento, Eq.(4.19). Em segunda ordem, a Eq.(4.17) pode ser corrigida, retornando a Eq.(4.20) e multiplicando-a por  $\hat{e}_\alpha$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \left( \partial_t + \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) \hat{e}_\alpha f_\alpha + \frac{1}{2} \delta \partial_t \sum_{\alpha} \left( \partial_t + \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right) \hat{e}_\alpha f_\alpha + \\ & + \frac{1}{2} \delta \sum_{\alpha} \left[ \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \partial_t + \left( \hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \right)^2 \right] \hat{e}_\alpha f_\alpha = 0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

O segundo termo se anula se  $f_\alpha$  satisfizer a Equação de Momento em primeira ordem, Eq.(4.17). O terceiro termo, entretanto, contém um termo cúbico em  $\hat{e}_\alpha$ , que corrige esta equação.

### 4.4.3 Relações úteis

A seguir apresentamos algumas relações que serão necessários na próxima seção [17]:

$$\sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i = 0, \quad (4.23)$$

$$\sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i (\hat{e}_\alpha)_j = \frac{M}{d} \delta_{ij}, \quad (4.24)$$

$$\sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i (\hat{e}_\alpha)_j (\hat{e}_\alpha)_k = 0, \quad (4.25)$$

$$\sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i (\hat{e}_\alpha)_j (\hat{e}_\alpha)_k (\hat{e}_\alpha)_l = \frac{M}{d(d+2)} (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (4.26)$$

onde  $M = 6$  (células hexagonais),  $d = 2$  (rede bidimensional) e  $i$  e  $j$  são os índices do espaço.

## 4.5 Expansão de Chapman-Enskog

Quando existe um equilíbrio local, a função de distribuição microscópica,  $f_\alpha(\vec{x}, t)$  deve depender somente dos parâmetros macroscópicos  $\vec{u}(\vec{x}, t)$  e  $n(\vec{x}, t)$  e de suas derivadas. Em geral, esta dependência pode ser muito complicada. Mas em processos hidrodinâmicos,

$\vec{u}$  e  $n$  variam lentamente com a posição e o tempo.

Baseados nestas suposições, podemos aproximar  $f_\alpha$  por uma série ou a expansão de Chapman-Enskog nas variáveis macroscópicas. Até a ordem requerida para fenômenos hidrodinâmicos usuais, os termos necessários nesta expansão são:

$$f_\alpha = f \left\{ \begin{aligned} &1 + c^{(1)} (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u}) + c^{(2)} \left[ (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 \right] + \\ &+ c_{\vec{\nabla}}^{(2)} \left[ (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla}) (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u}) - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] + \dots \end{aligned} \right\}, \quad (4.27)$$

onde  $c^{(i)}$  são os coeficientes a serem encontrados. Os primeiros três termos representam a mudanças na densidade das partículas microscópicas em consequência das mudanças na velocidade macroscópica do fluido; o quarto termo leva em conta a dependência, em primeira ordem, das densidades da partícula com as variações espaciais macroscópicas da velocidade do fluido. As estruturas destes termos podem ser deduzidas, basicamente, da necessidade de gerar as quantidades escalares,  $f_\alpha$ , a partir dos vetores  $\hat{e}_\alpha$ ,  $\vec{u}$  e  $\vec{\nabla}$ . As formas para  $|\vec{u}|^2$  e  $(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})$  nesta equação foram escolhidas de modo a satisfazer os vínculos descritos nas Eqs.(4.8) e (4.9) independente dos valores que possam assumir os coeficientes  $c^{(2)}$  e  $c_{\vec{\nabla}}^{(2)}$ .

A constante  $f$  na Eq.(4.27) pode ser obtida impondo o vínculo dado pela Eq.(4.8),

$$f = \frac{n}{6}, \quad (4.28)$$

enquanto que através da Eq.(4.9) obtemos:

$$c^{(1)} = 2. \quad (4.29)$$

Para encontrar essas constantes utilizamos as relações úteis Eqs.4.23 -4.26, dadas na seção anterior.

Os valores específicos de  $c^{(2)}$  e  $c_{\vec{\nabla}}^{(2)}$  só podem ser determinados pela solução explícita da equação cinética (Eq.4.7), que inclui os termos de colisão. No entanto, a estrutura das



equações macroscópicas pode ser derivada da Eq.(4.27) sem o conhecimento dos valores exatos destes parâmetros.

Para um sistema uniforme em equilíbrio, com  $\vec{u} = \vec{0}$ , todos os  $f_\alpha$  serão dados por:

$$f_\alpha = f = \frac{n}{6} \quad (4.30)$$

Neste caso, o tensor fluxo do momento (Eq.(4.18)) é igual ao tensor da pressão, obtido na teoria cinética de gases:

$$p_{ij} = \sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i (\hat{e}_\alpha)_j f = \frac{1}{2} n \delta_{ij}, \quad (4.31)$$

onde a segunda igualdade segue da Eq.(4.24). Esta fórmula é espacialmente isotrópica, apesar da anisotropia contida na rede do autômato celular. Esta equação nos dá a equação de estado que relaciona a pressão escalar à densidade total de partículas do autômato celular para fluidos:

$$p = \frac{n}{2} \quad (4.32)$$

Quando  $\vec{u} \neq \vec{0}$ , a componente do tensor  $\Pi_{ij}$  pode ser obtida substituindo a expansão para  $f_\alpha$  (Eq.(4.27)), na Eq.(4.18), i.e.,

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & \sum_{\alpha} (\hat{e}_\alpha)_i (\hat{e}_\alpha)_j \times \\ & f \left\{ \begin{aligned} & 1 + c^{(1)} (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u}) + c^{(2)} [(\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} |\vec{u}|^2] + \\ & + c_{\vec{\nabla}}^{(2)} \left[ (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla}) (\hat{e}_\alpha \cdot \vec{u}) - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] + \dots \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

que fazendo uso das relações úteis, nos dá a nova expressão para a componente do tensor  $\Pi_{ij}$ ,

$$\Pi_{ij} = \frac{n}{2} \delta_{ij} + \frac{n}{4} c^{(2)} \left[ u_i u_j - \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 \delta_{ij} \right] + \frac{n}{4} c_{\vec{\nabla}}^{(2)} \left[ \partial_i u_j - \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \delta_{ij} \right] \quad (4.33)$$

Substituindo este resultado na Eq.(4.19), obtém-se a Equação do Momento corrigida:

$$\begin{aligned} & \partial_t (n\vec{u}) + \frac{1}{4}nc^{(2)} \left\{ (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \left[ \vec{u} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \frac{1}{2}\vec{\nabla} |\vec{u}|^2 \right] \right\} \\ = & -\frac{1}{2}\vec{\nabla}n - \frac{1}{8}nc_{\vec{\nabla}}^{(2)}\vec{\nabla}^2\vec{u} - \frac{1}{4}\Xi \end{aligned} \quad (4.34)$$

onde

$$\Xi = \vec{u} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) (nc^{(2)}) - \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 \vec{\nabla} (nc^{(2)}) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left( nc_{\vec{\nabla}}^{(2)} \right) - \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \vec{\nabla} \left( nc_{\vec{\nabla}}^{(2)} \right) \quad (4.35)$$

A forma da Eq.(4.33) para  $\Pi_{ij}$  é obtida exatamente da expansão da Chapman-Enskog, Eq.(4.27). No entanto, a Eq.(4.22) dá as correções a Equação do Momento até segunda ordem do parâmetro da rede  $\delta$ . Estas correções podem ser comparadas com os efeitos incluídos em Eq.(4.34).

## 4.6 Equações de Navier-Stokes

A equação de Navier-Stokes de dimensão "d" para um fluido contínuo pode ser escrita como:

$$\partial_t (n\vec{u}) + \lambda n (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = -\vec{\nabla}p + \mu \vec{\nabla}^2\vec{u} + \left( \zeta + \frac{1}{d}\mu \right) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \quad (4.36)$$

onde  $p$  é a pressão,  $\mu$  e  $\zeta$  são, respectivamente, a viscosidade dinâmica e o segundo coeficiente de viscosidade [18] (utilizado para descrever fluidos compressíveis). Esta equação é similar a Eq.(2.34) em 2D, a menos do termo que contém  $\zeta$ . O coeficiente  $\lambda$  que aparece no termo convectivo é, usualmente, restrito a assumir valor 1 pela invariância de Galileu.

A equação macroscópica, Eq.(4.34) para o modelo de gás de rede é muito parecida com a forma da equação de Navier-Stokes apresentada na Eq.(4.36). Os termos convectivo e viscosos estão presentes, e possuem a estrutura usual. O termo de pressão, também, aparece de acordo com a equação de estado, Eq.(4.32), ou seja,  $p = n/2$ . No

entanto, existe alguns termos adicionais. Termos proporcionais a  $\vec{u} \vec{\nabla} n$  na Eq.(4.34) devem ser desconsiderados, pois eles dependem das características das funções distribuição microscópica, que estão além dos termos incluídos na expansão de Chapman-Enskog, Eq.(4.27). A Equação da Continuidade, Eq.(4.15), mostra que termos proporcionais a  $\vec{u} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u})$  podem ser desprezados. O termo proporcional a  $\vec{\nabla} |\vec{u}|^2$  permanece na equação, Eq.(4.34), porém deve ser somado ao termo  $\vec{\nabla} n$ , dando origem a um termo de **pressão efetiva** que contribuirá para a energia cinética do fluido [17].

A forma dos termos viscosos na Eq.(4.36) implica que para o modelo de gás de rede, considerado aqui, temos:

$$\zeta = 0. \quad (4.37)$$

Comparando as duas equações, (4.36) e (4.34), obtemos as seguintes expressões para a viscosidade dinâmica:

$$\mu = -\frac{1}{8}nc_{\vec{\nabla}}^{(2)} \quad (4.38)$$

e para o coeficiente  $\lambda$ ,

$$\lambda = \frac{1}{4}c^{(2)} \quad (4.39)$$

que aparece no termo convectivo que, em geral, não é igual a 1. Em fluidos contínuos, a derivada total que tem a forma  $d/dt = \partial/\partial t + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}$  (Eq.(2.4)) possui invariância de Galileu. A invariância de Galileu atesta que as leis fundamentais da física devem permanecer inalteradas de um referencial inercial para outro. No entanto, no formalismo de autômatos celulares para fluidos, o segundo termo da derivada total  $\vec{u} \cdot \vec{\nabla}$  é substituído por  $\hat{e}_\alpha \cdot \vec{\nabla}$ , contribuindo com pesos diferentes, levando os termos convectivos a possuírem coeficientes distintos. Esse problema pode ser solucionado com um re-escalamento da velocidade  $\vec{u}$  [17]:

$$\vec{u} = \mu \vec{u}. \quad (4.40)$$

Em geral, qualquer sistema que satisfaça a equação da continuidade, Eq.(2.14), e as equações de Navier-Skokes, Eq.(2.34), pode ser usado para modelar um fluido, já que

os detalhes do comportamento microscópico não são importantes. O modelo de gás de rede modela o comportamento microscópico de um fluido e tem a vantagem de poder ser implementado facilmente em um computador. As propriedades do fluido são incorporadas através das regras de atualização. Esse modelo será utilizado nas simulações apresentadas no próximo Capítulo.

# Capítulo 5

## Resultados das Simulações

Para situações complexas, tais como: o sistema de clima global, o El Niño, ou a sustentação em uma asa de avião e etc., as soluções para as Equações de Navier-Stokes, frequentemente, são encontradas com a ajuda de computadores. Este é um campo da ciência conhecido como Dinâmica dos Fluidos Computacional ou CFD, sigla do inglês Computational Fluid Dynamics.

Neste Capítulo discutiremos as características gerais do algoritmo desenvolvido neste trabalho utilizando modelo de gás de rede para fazer a simulação do escoamento do fluido através de um percurso em " $L$ ", com ou sem a presença de barreira, onde variou-se o tamanho da barreira e a pressão a que o fluido foi submetido. Mostraremos e analisaremos os resultados de nossas simulações obtidas com ajuda do programa gráfico Origin 8.0.

### 5.1 Armazenamento de Dados

Descreveremos, agora, o procedimento utilizado para armazenar as informações sobre as partículas, de um sítio, em um arranjo de inteiros, que chamaremos de vetor  $ilat(nn)$ , onde o sítio é representado por  $nn$ . A dimensão deste vetor deve ser igual ou superior ao número de sítios da rede. Os oitos bits de um byte são rotulados de 0 a 7. Cada sítio pode ter até 6 partículas, apenas uma em cada direção  $\hat{e}_\alpha$ . Foram usados os primeiros

seis bits, de 0 até 5, para representar as partículas se movendo nas seis direções possíveis. O bit 6 é reservado para uma partícula em repouso. Se queremos ocupar um sítio com uma partícula fixa para representar uma barreira, usamos o bit 7. Então, a partícula com direção  $\hat{e}_\alpha$  fica representada da seguinte forma:

Barreira	Partícula em repouso	$\hat{e}_5$	$\hat{e}_4$	$\hat{e}_3$	$\hat{e}_2$	$\hat{e}_1$	$\hat{e}_0$
$2^7$	$2^6$	$2^5$	$2^4$	$2^3$	$2^2$	$2^1$	$2^0$
128	64	32	16	8	4	2	1

Por exemplo, se o vetor  $ilat(nn)$  recebe o número decimal 43, que em binário é 00101011, fica assim representado:

Barreira	Partícula em repouso	$\hat{e}_5$	$\hat{e}_4$	$\hat{e}_3$	$\hat{e}_2$	$\hat{e}_1$	$\hat{e}_0$
$2^7$	$2^6$	$2^5$	$2^4$	$2^3$	$2^2$	$2^1$	$2^0$
0	0	1	0	1	0	1	1

que nos informa que o sítio possui quatro partículas com velocidades  $\hat{e}_0$ ,  $\hat{e}_1$ ,  $\hat{e}_3$  e  $\hat{e}_5$ .

Para sabermos se uma direção num sítio está ou não ocupada por uma partícula, utilizamos o comando  $btest(ilat(nn), idir)$ , onde  $idir$  é um inteiro que varia de 0 a 5, os índices dos vetores velocidades. O  $btest$  é uma função intrínseca do Fortran e tem como resultado a função lógica: "true" (verdadeiro) ou "false" (falso). Esta função verifica se o vetor  $ilat(nn)$ , possui partícula na direção  $\vec{e}_{idir}$ . Por exemplo:

Função	Decimal	Binário	Resposta
$btest(21, 1)$	21	00010101	.FALSE.
$btest(4, 2)$	4	00000100	.TRUE.

### 5.1.1 Regras de Colisão

As vinte regras de colisão apresentadas na Fig.3.8, são armazenadas em um vetor  $rule(n)$  onde seu argumento dá o estado do sítio antes da colisão e o valor do vetor dá o estado

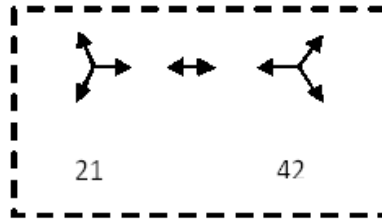


Figura 5.1: Regras de colisão entre partículas com conservação de momento.

do sítio  $n$  após a colisão.

Por exemplo, assumamos que antes de uma colisão existem três partículas com velocidades  $\hat{e}_0$ ,  $\hat{e}_2$  e  $\hat{e}_4$  em um sítio, como mostra a Fig.5.1, em notação binária 00010101; o decimal correspondente é 21. Podemos observar que após a colisão existem três partículas com velocidades  $\hat{e}_1$ ,  $\hat{e}_3$  e  $\hat{e}_5$ , em notação binária 00101010; o decimal correspondente é 42. Esta colisão é armazenada em um vetor  $rule(21)=42$ .

Para alterar as velocidades nas atualizações de nosso programa, faz-se uso da função intrínseca do FORTRAN  $ibset(ilat(nn), idir)$ . O resultado tem o valor da sequência de bits de  $ilat(nn)$ , exceto que para o bit na posição  $idir$  é atribuído o valor 1. Por exemplo:

Função	Decimal	Binário	Resposta	Resposta em binário
$ibset(8, 1)$	8	00001000	10	00001010

## 5.2 Algoritmo do Código-Fonte

O fluxograma dos passos realizados no programa, desenvolvido neste trabalho, está representado na Fig.5.2.

Iniciamos o código-fonte definindo a dimensão da rede através das variáveis  $L_x$  e  $L_y$ . O número de sítios da rede é  $L_x \times L_y$ . Se tivermos  $N$  sítios ocupados com 6 partículas podemos calcular a densidade de partículas total por  $\rho = 6N / (L_x \times L_y)$ . Estabelecemos quantas atualizações desejamos, em seguida, zeramos todos os sítios da rede e entramos com a configuração inicial de partículas, fronteiras e barreira. A configuração inicial de

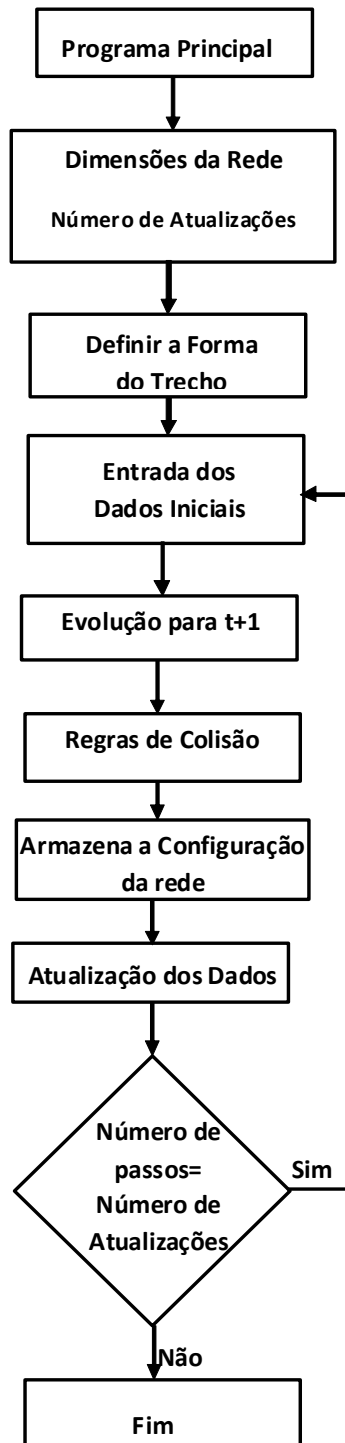


Figura 5.2: Fluxograma do código-fonte utilizado para a simulação do escoamento de um fluido.



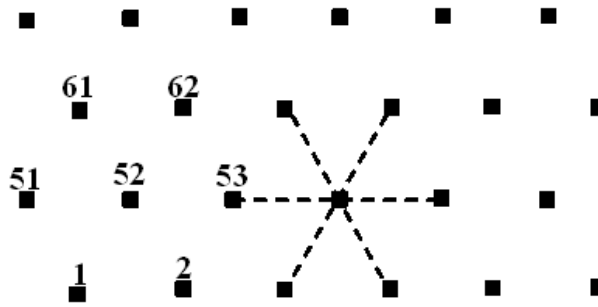


Figura 5.3: Sítio 52, numa rede  $50 \times 50$  e seus vizinhos mais próximos.

partículas depende da posição da entrada de escoamento, por exemplo, se o fluido se move na horizontal, entrando pela esquerda, cada sítio receberá, apenas três partículas, cada uma com uma das seguintes velocidades  $\hat{e}_0$ ,  $\hat{e}_1$  e  $\hat{e}_5$ , que corresponde ao número 35, logo  $ilat(nn)=35$  nesses sítios.

O próximo passo, armazena na matriz  $nn(n,idir)$  a informação que uma partícula no sítio  $nn$  com direção  $idir$  se moverá para o sítio vizinho  $n$ . Por exemplo, os vizinhos do sítio 52, numa rede  $50 \times 50$  são mostrados na Fig.5.3, que são as possíveis direções a ser tomadas. Em nosso código, temos  $nn(61,4)=52$ , ou ainda,  $nn(2,1)=52$ . Nesta subrotina, também, estabelecemos as condições periódicas.

Em seguida, chamamos a subrotina que contém todas as 20 regras de colisão entre partículas, ver Fig.3.8, que estão armazenadas no vetor  $rule(n)$ , descrito na seção de armazenamento das regras de colisão, que foi discutido anteriormente. Esta configuração é salva em um arquivo, e finalmente chamamos a subrotina que atualiza a rede.

Para melhor explicar esta atualização colocamos uma parte do código-fonte na Fig.5.4. Nesta subrotina é feito uma varredura em toda a rede, e em todas as velocidades de cada sítio, verificando se o sítio possui partícula com dada velocidade. Se não houver partícula nada será feito, se houver, verificamos se este sítio é uma barreira, se for, é utilizada as regras de colisão com barreira ou fronteira (inversão-nvl e reflexão-nv). Caso não seja barreira, a partícula se moverá para o sítio vizinho pré-determinado. Contudo, se o sítio

```

do j=1,ly
do i=1,lx
n=(j-1)*lx+i
do dir=0,5
if(btest(lat(nn(n,dir)),dir))then
if(btest(lat(n),barrier))then
!Reflexão
if(j.eq.10.or.j.eq.20.or.j.eq.1.or.j.eq.ly)then
latn(nn(n,dir))=ibset(latn(nn(n,dir)),nv(dir))
else
latn(nn(n,dir))=ibset(latn(nn(n,dir)),nvl(dir))
endif
else
!move a particula para o proximo vizinho
latn(n)=ibset(latn(n),dir)
if(n.eq.j*lx)then
if(dir.eq.0.or.dir.eq.1.or.dir.eq.5)then
latn(n)=latn(n)-2**dir
endif
endif
endif
endif
enddo
enddo
enddo

```

Figura 5.4: Trecho do código-fonte da subrotina de atualização.

for referente ao final do duto, a partícula será removida, para que não volte para o início do duto, pela condição periódica.

Em seguida, perguntamos se o número de atualizações já foi atingido. Se a resposta for sim, finalizamos o programa, se a resposta for não, chamamos uma subrotina que atualiza os dados de entrada.

Para implementar este programa utilizamos o Visual Fortran 6.0 da Copyright Digital Equipment Corporation.

## 5.3 Visualização

Os parâmetros representados na Fig.3.7 são obedecidos na visualização do campo de velocidade apresentados neste Capítulo.

É necessária uma quantidade significativa de atualizações para que a simulação gráfica da evolução do campo de velocidades já esteja estacionária, isto é, a passagem completa do fluido através do trecho simulado já esteja completamente preenchido, e não mais evolua com o tempo. Os arquivos com cada passo de tempo são visualizados no programa Origem 8.0.

## 5.4 Simulações

### 5.4.1 Duto horizontal sem barreira

A primeira simulação realizada foi para um duto horizontal e linear, representado por uma rede  $50 \times 30$ , sem barreira. A cada intervalo de tempo três partículas são injetadas, com velocidades  $\hat{e}_0$ ,  $\hat{e}_1$  e  $\hat{e}_5$  em cada sítio situado na lateral esquerda do duto. A Fig.5.5 nos mostra a representação gráfica da média das velocidades de cada sítio desta posição inicial. Nesta rede entram a cada intervalo de tempo 90 partículas. As partículas são removidas no lado direito da rede para não interferirem no escoamento.

As Figuras de 5.6 até 5.8 mostram as evoluções desta simulação, utilizamos condições

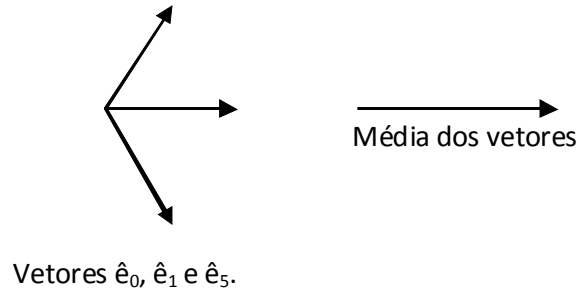


Figura 5.5: Representação da média de vetores de cada célula na configuração inicial em um duto linear e horizontal.

de contorno periódicas nas fronteiras. A letra  $t$  que aparece nas figuras de simulação representa a quantidade de atualizações realizadas pelo programa.

#### 5.4.2 Duto Horizontal com Barreira $10 \times 10$

A este escoamento introduzimos uma barreira  $10 \times 10$ , e observamos que as condições de fronteira periódicas não simulavam o comportamento esperado para o campo de velocidades. A Fig.5.9 mostra o escoamento do fluido através de uma numa barreira localizando, o ponto inferior da barreira, na posição inicial  $20 \times 10$  de tamanho igual a  $10 \times 10$ . Notamos que o escoamento apresenta um comportamento turbulento na frente e atrás da barreira, devido as contribuições das médias dos vetores velocidades. Este comportamento nos motivou a retirar a condição periódica na vertical e verificar o novo comportamento do modelo, quando se impõe as condições de inversão e de reflexão na vertical. A Fig.5.10 ilustra esta nova situação, onde aparecem apenas turbulência após a barreira. Os "buracos" obtidos após a barreira são, na verdade, sítios nos quais a média dos vetores velocidade são iguais a zero.

Em nossa rede em forma de "L" decidimos pela utilização das condições de inversão de velocidade (se colide com  $\vec{v}$  volta com  $-\vec{v}$ ) ou reflexão, colisões onde o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão, por melhor representar o escoamento do fluido.

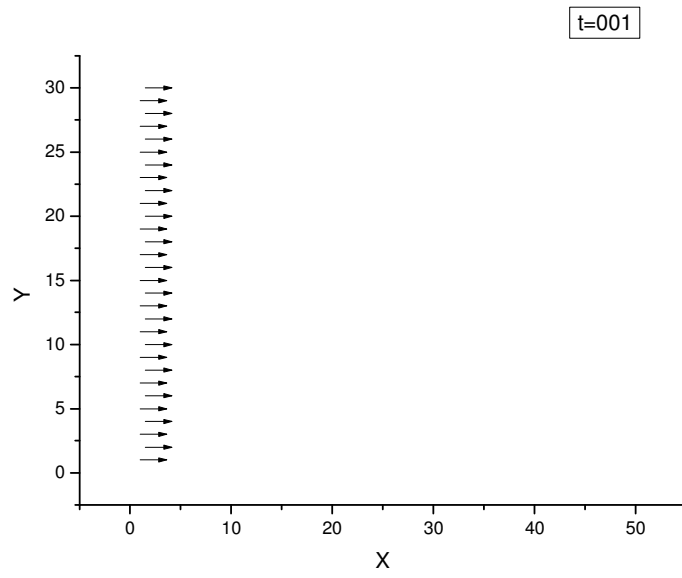


Figura 5.6: Campo de velocidades de um fluido em um duto horizontal, em  $t = 1$ .

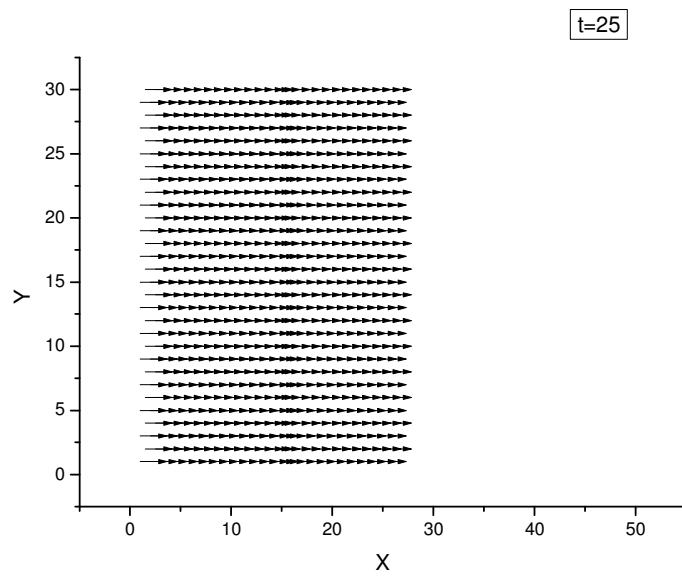


Figura 5.7: Campo de velocidades de um fluido em um duto horizontal, em  $t = 25$ .

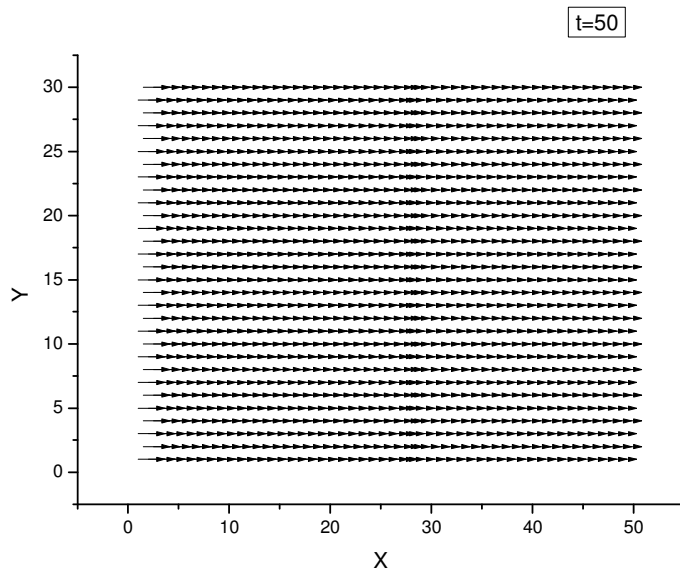


Figura 5.8: Campo velocidades de um fluido em um caminho duto, em  $t = 50$ .

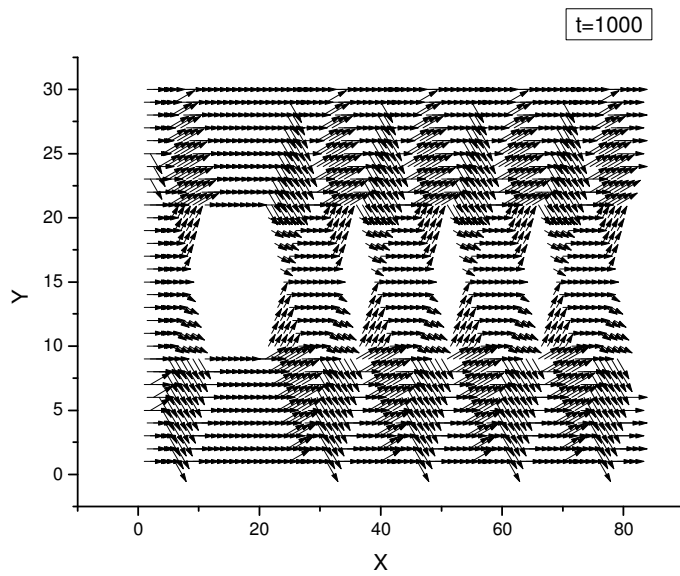


Figura 5.9: Campo de velocidades de um fluido em um caminho horizontal com barreira  $10 \times 10$ , em  $t = 1000$ , usando condições periódicas nas fronteiras.

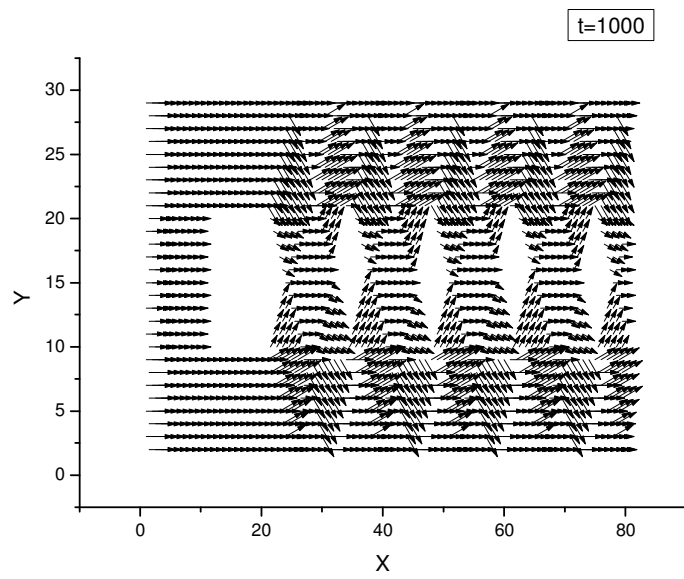


Figura 5.10: Campo de velocidades de um fluido em um caminho horizontal com barreira  $10 \times 10$ , em  $t = 1000$ , usando condições de reflexão e inversão nas fronteiras verticais e na barreira.

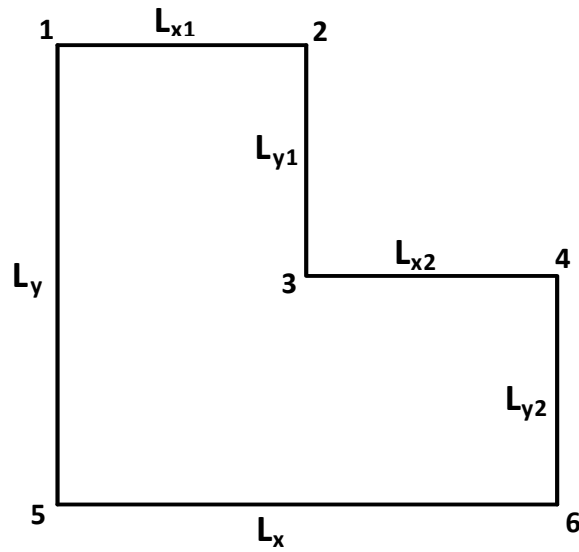


Figura 5.11: Duto em forma de "L" que será percorrido pelo fluido.

### 5.4.3 Duto em forma de "L" sem barreira

O segundo estudo foi realizado para o escoamento de fluido através de um duto em forma de "L" (ver Fig.5.11), motivados pelo formato do trecho do Rio Solimões, representado na Fig.0.1. A cada intervalo de tempo duas partículas são injetadas pelo lado superior da rede em "L" (segmento de reta  $\overline{12}$  da Fig.5.11), com velocidades  $\hat{e}_1$  e  $\hat{e}_2$ , em cada sítio, porque estamos simulando um escoamento vertical. Esta situação é representada por 00000110 em notação binária, que equivale em notação decimal 6. É este número 6 que colocamos no código, por exemplo:  $ilat(nn)=6$ . Na visualização da condição inicial aparecem apenas vetores apontando para baixo, conforme mostra a Fig. 5.12, para uma rede  $50 \times 50$ , onde  $L_{x1} = 25$  e  $L_{y1} = 25$ .

A Fig.5.13 mostra as primeiras interferências que ocorrem devido as colisões com as paredes laterais do trecho quando  $t = 20$ . As condições de reflexão e de inversão são utilizadas nas fronteiras para melhor descrever a evolução do fluido.

Ainda observando a evolução do campo de velocidades, há dois instantes em que,



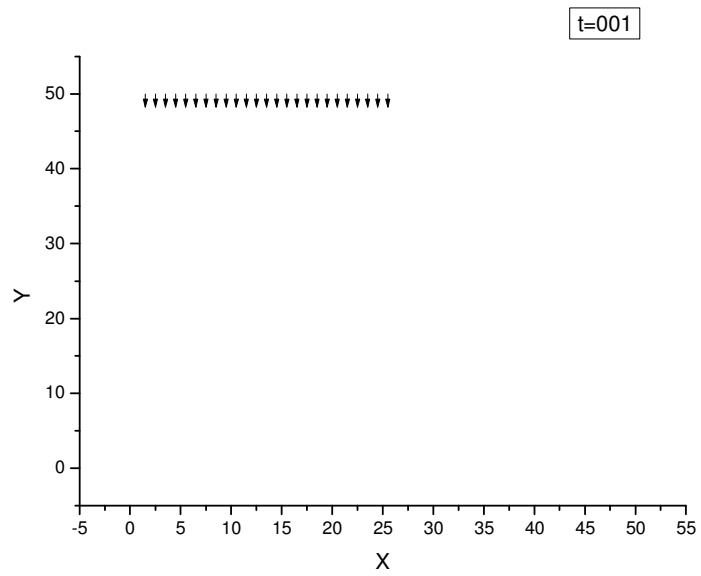


Figura 5.12: Condição inicial de um duto em  $L$ , para uma rede  $50 \times 50$  com  $L_{x1} = 25$  e  $L_{x2} = 25$ .

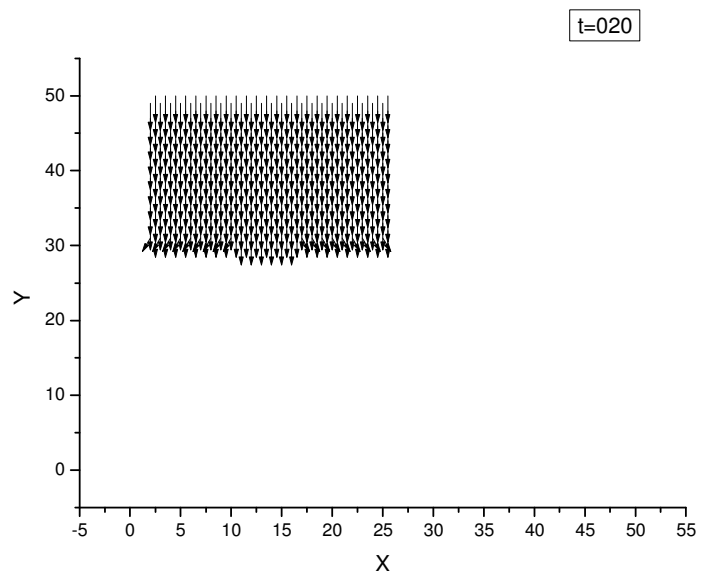


Figura 5.13: Campo de velocidades em um duto em forma de  $L$  sem barreiras, no passo  $t = 20$ .

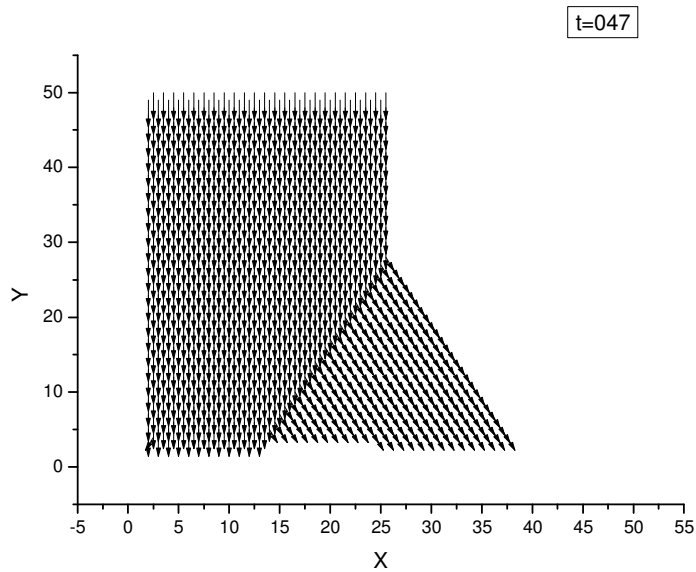


Figura 5.14: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  sem barreiras, no passo 47.

claramente, notamos interferência devido as colisões: a primeira é em torno da posição  $(25, 25)$  da Fig.5.14, que ocorre devido a falta de colisões das partículas com a lateral direita do trecho, que faz com que a média das velocidades em determinados sítios sejam apenas  $\hat{e}_1$ ; e a segunda é vista em torno do canto inferior do trecho (ponto 5 da Fig.5.11), que ocorre devido as várias colisões das partículas com a lateral esquerda e com a parte inferior do trecho (ver Fig.5.15). Apesar de termos realizado várias mudanças das condições de fronteira neste ponto, pois deveríamos ter obtido nele um movimento semi-circular, não foi possível uma boa descrição deste comportamento. Acredita-se que a forma da rede hexagonal não permita uma boa visualização deste ponto ou, ainda, que outras condições de fronteira possam descrever-los melhor. Ainda assim, podemos observar uma agitação onde já era de se esperar.

A Fig.5.16 mostra a evolução para  $t = 140$ , onde já podemos observar a rede estável.

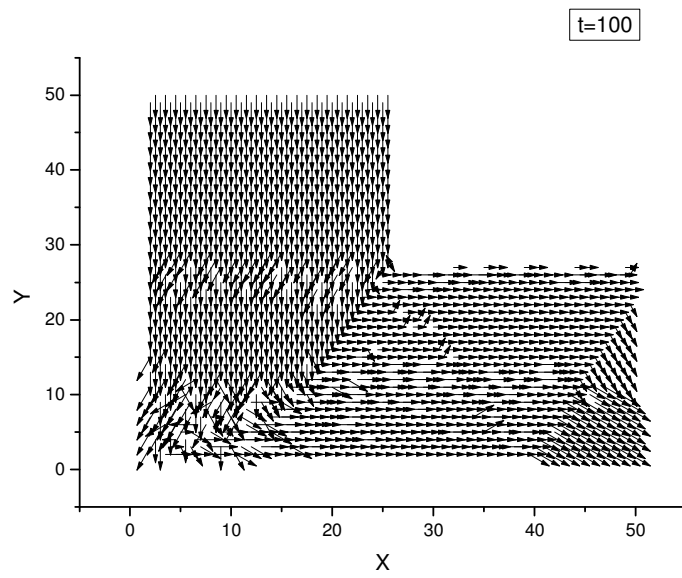


Figura 5.15: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  sem barreiras, no passo 100.

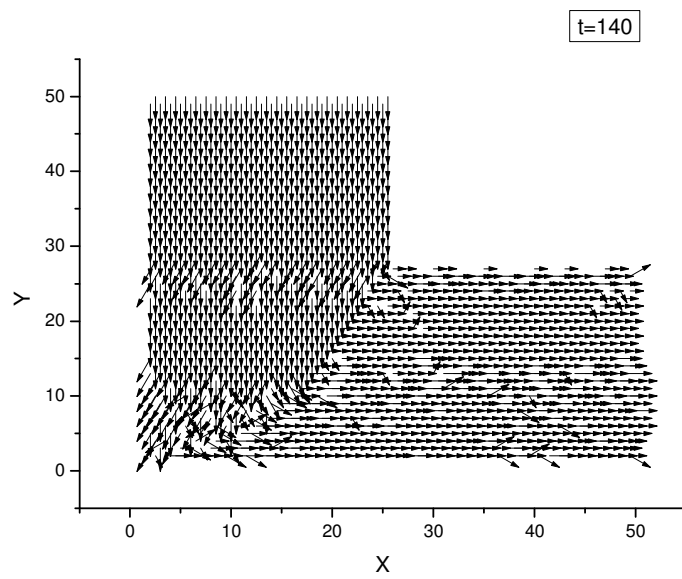


Figura 5.16: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  sem barreiras, no passo 140.

#### 5.4.4 Duto em forma de "L" com barreira

Utilizamos o formato em  $L$ , com dimensões  $L_x = 50$ ,  $L_y = 50$ ,  $L_{x1} = 25$  e  $L_{y1} = 25$  (observe a Fig.5.11), e fixamos o início de todas as nossas barreiras na posição  $(10, 10)$ , localização do seu canto inferior. Estas barreiras simulam um banco de areia em um rio, como mostra a Fig.0.1. Foram utilizados vários tipos de barreiras, variando-se comprimento e largura, para verificar o comportamento do campo de velocidades ao contorná-la. Nosso trecho continua recebendo o valor  $ilat(n)=6$ , como condição inicial.

Outro fator observado foi o comportamento do escoamento do fluido quando a pressão era alterada. Para isso foi necessário modificar o código-fonte e, em vez de, entrarmos com partículas a cada atualização, passamos a aumentar o intervalo de tempo para a injeção de partículas na posição inicial.

##### **Barreira (10x10)**

As Figs.5.17 até 5.19, mostram o campo de velocidades quando uma barreira  $(10 \times 10)$  é colocada no trecho. Na Fig.5.19, vemos claramente que o movimento simulado possui características de turbulência após transpor a barreira, e que se repete em intervalos iguais. Ao aumentarmos o comprimento do duto para  $L_x = 80$ , verificamos que este comportamento permanece inalterado.

Resolvemos, então diminuir a pressão, fazendo com que no código-fonte entre, em tempo sim tempo não, 50 partículas na posição inicial, duas em cada célula. A Fig.5.21 representa o campo de velocidades nesta condição. Observamos que o comportamento do escoamento é o mesmo, porém foi necessário uma quantidade maior de atualizações para o escoamento estabilizar.

A Fig.5.22 nos dá o comportamento para entrada de partículas apenas a cada três intervalos de tempo e, qualitativamente, o comportamento é exatamente o mesmo observado nas Figs.5.19 até 5.21.

Diminuímos ainda mais a pressão, agora com entrada de partículas a cada quatro intervalos de tempo, porém não houve alteração da forma do campo de velocidades (ver

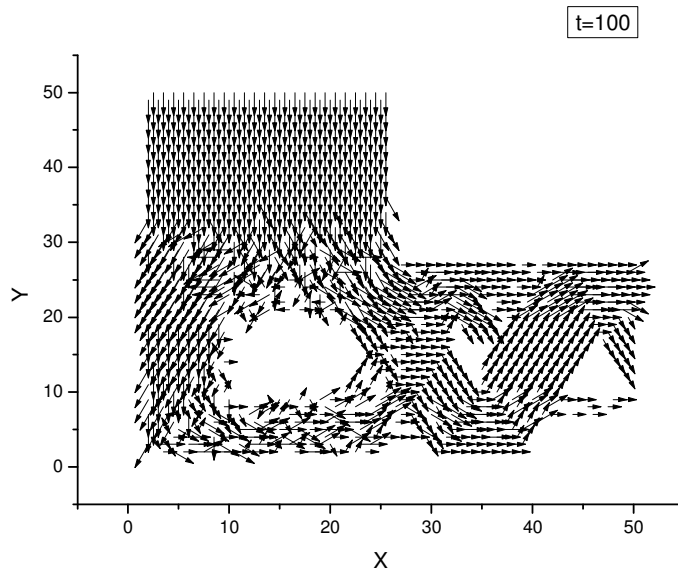


Figura 5.17: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 100 passos.

Fig.5.23).

### Barreira (10x5)

A Fig.5.24 mostra a diminuição da barreira para  $10 \times 5$  no intervalo de tempo igual a 200. Apesar de ainda se observar o comportamento turbulento após ultrapassagem da barreira, temos um comportamento menos convectivo, como era de se esperar pois a barreira foi reduzida.

Como no caso da barreira  $10 \times 10$ , a pressão foi, também, reduzida mantendo-se o mesmo comportamento da Fig.5.24, apenas foi necessário aumentar o número de atualizações para o preenchimento completo da rede.

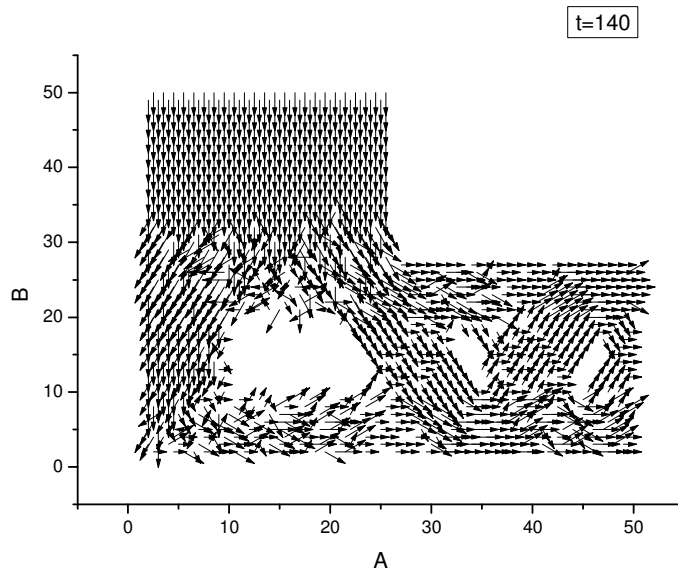


Figura 5.18: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 140 passos.

### Barreira (5x10)

Invertamos a barreira para  $5 \times 10$ . O campo de velocidades, Fig.5.28, nos dá a situação estável do escoamento nesta condição.

Na Fig.5.28, o campo de velocidades aparece mais uniforme devido a diminuição da seção de choque na vertical, mantendo a forma, porém com maior espaçamento entre as repetições.

As Figs.5.29, 5.30 e 5.31 representam as variações de pressão. Novamente foi verificado que a variação da pressão não altera o comportamento qualitativo do escoamento.

### Barreira (5x5)

A Fig.5.32 mostra os campos de velocidades para uma barreira ainda menor e não apresenta, na turbulência, os espaços vazios.

A variação da pressão está representada nas Figs.5.33 até 5.35. No Capítulo 6 apre-

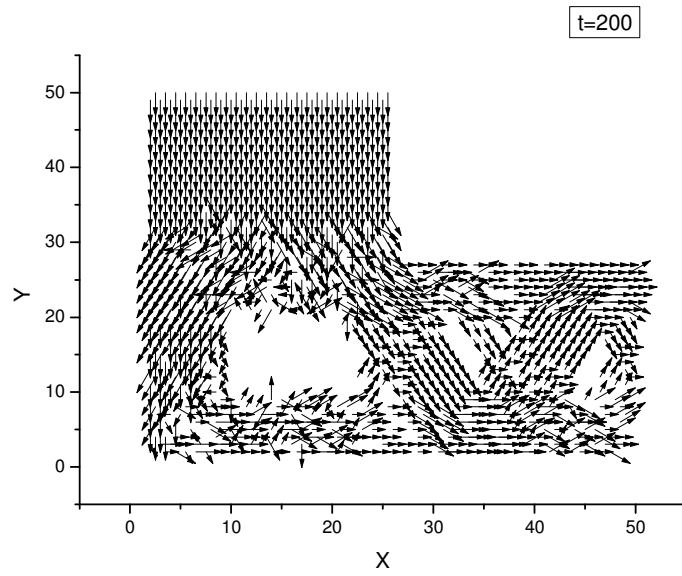


Figura 5.19: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 200 passos.

sentaremos nossas conclusões sobre as simulações mostradas neste Capítulo.

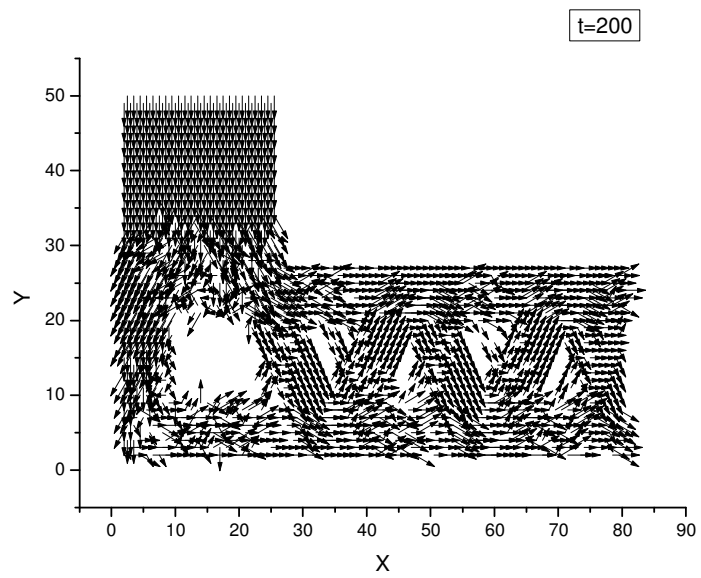


Figura 5.20: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 200 passos.



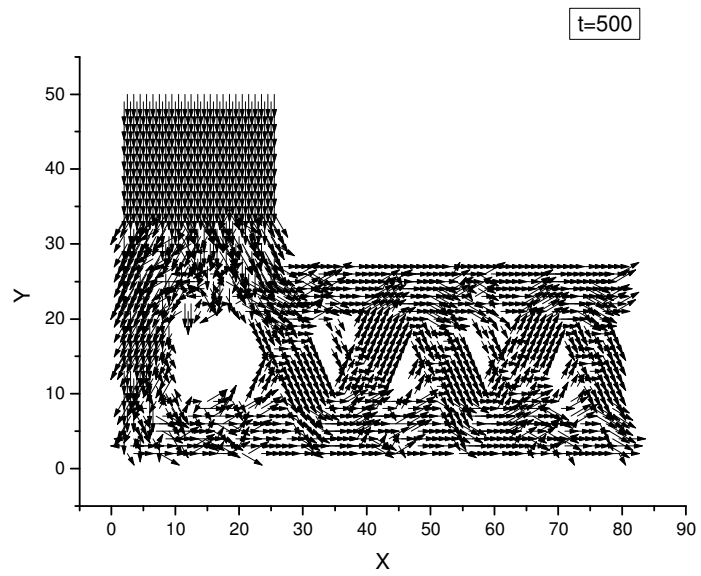


Figura 5.21: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo.

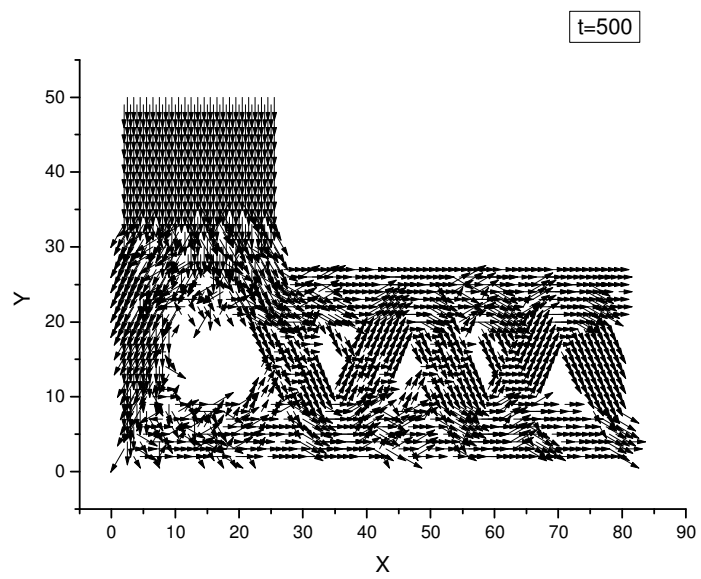


Figura 5.22: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo.

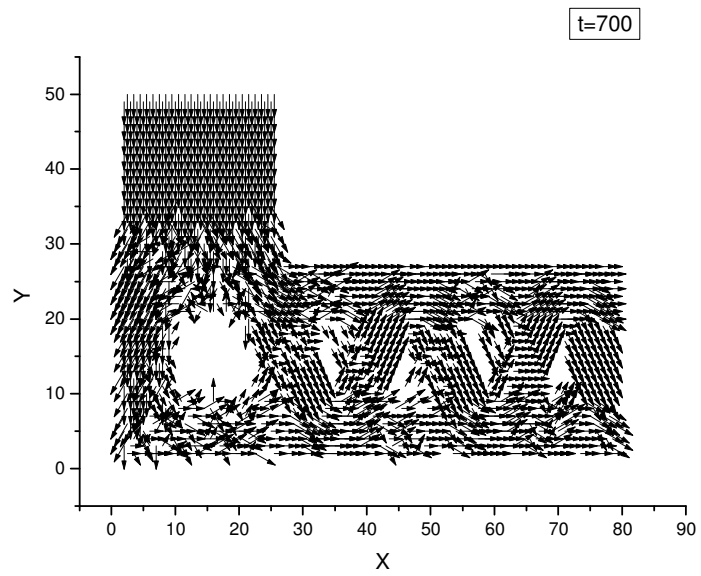


Figura 5.23: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 10$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo.

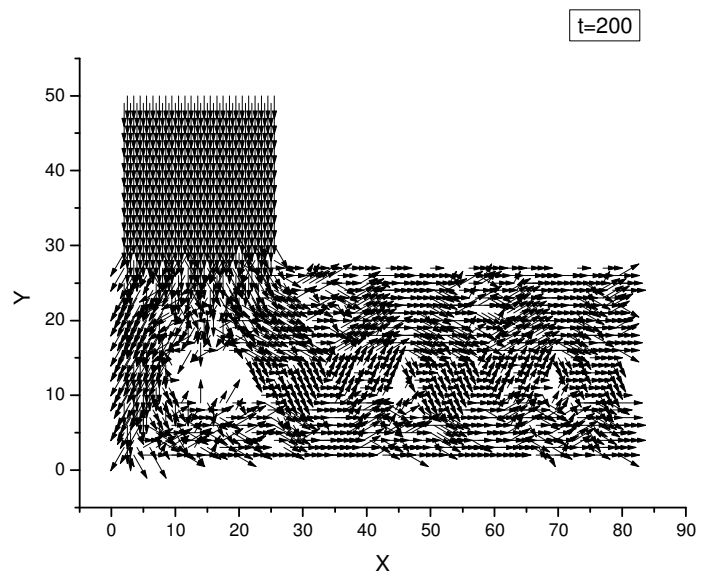


Figura 5.24: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 5$ , após 200 passos.

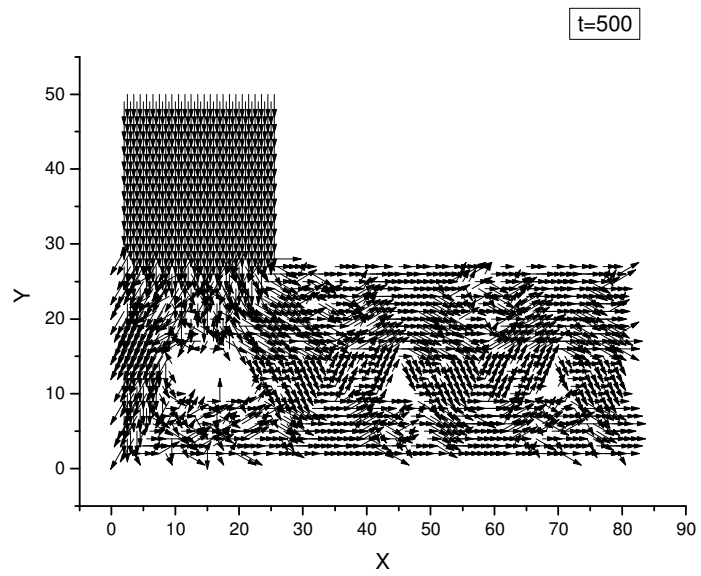


Figura 5.25: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo.

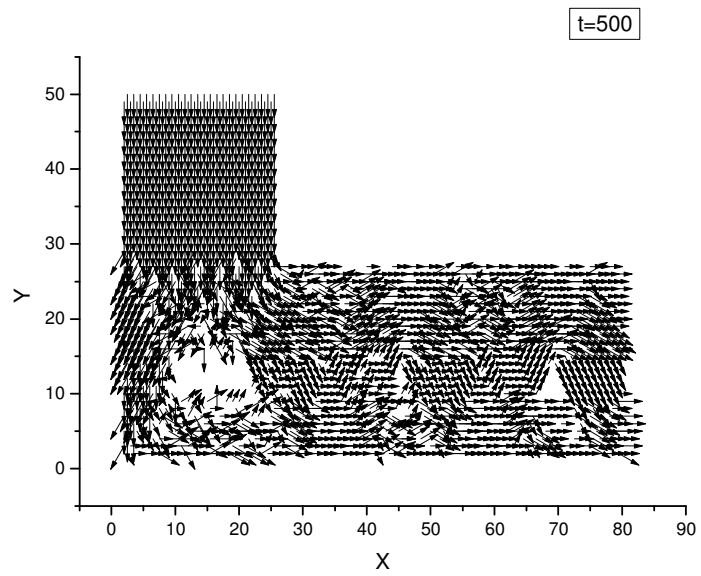


Figura 5.26: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo.

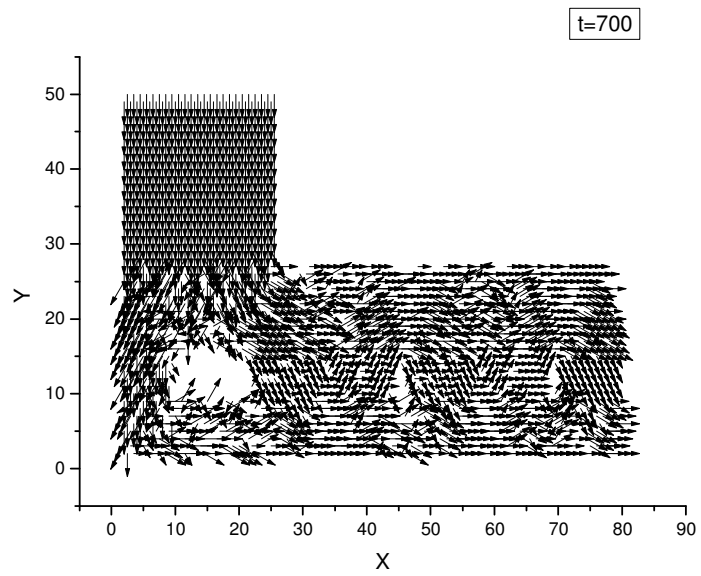


Figura 5.27: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $10 \times 5$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo.

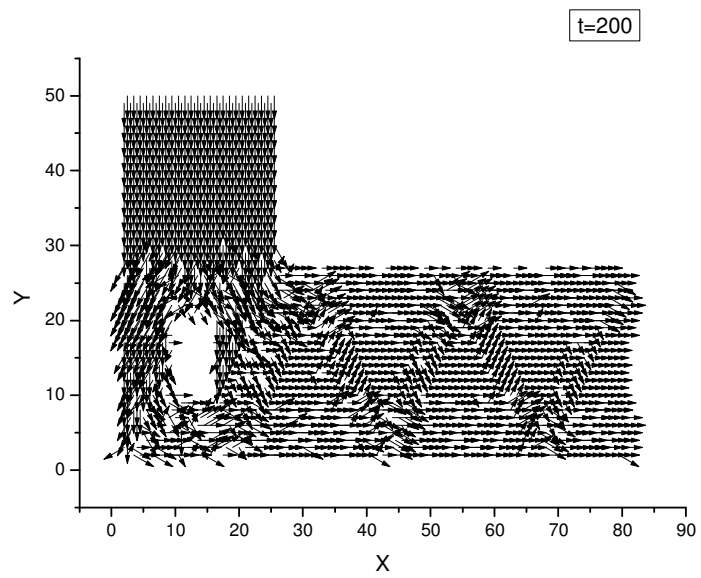


Figura 5.28: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 10$ , após 200 passos.



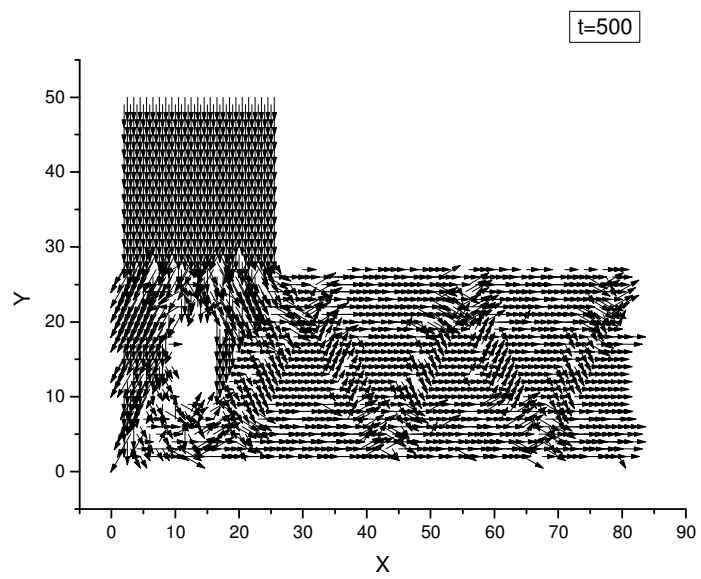


Figura 5.29: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo.

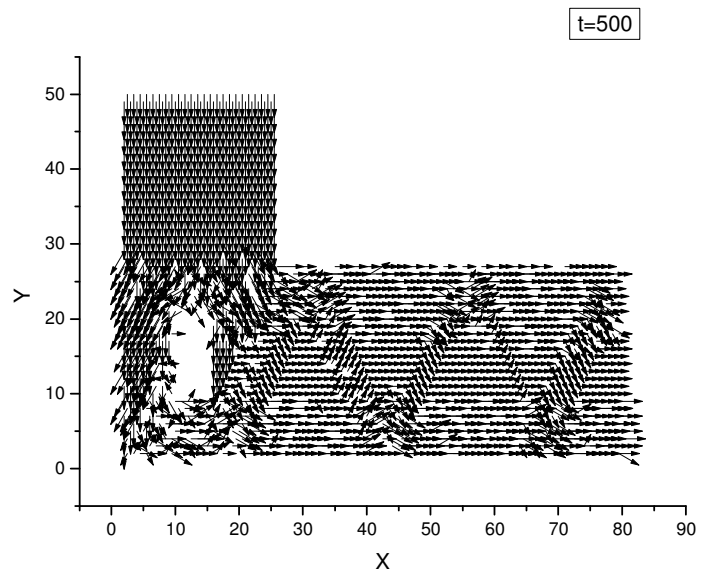


Figura 5.30: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 10$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo.

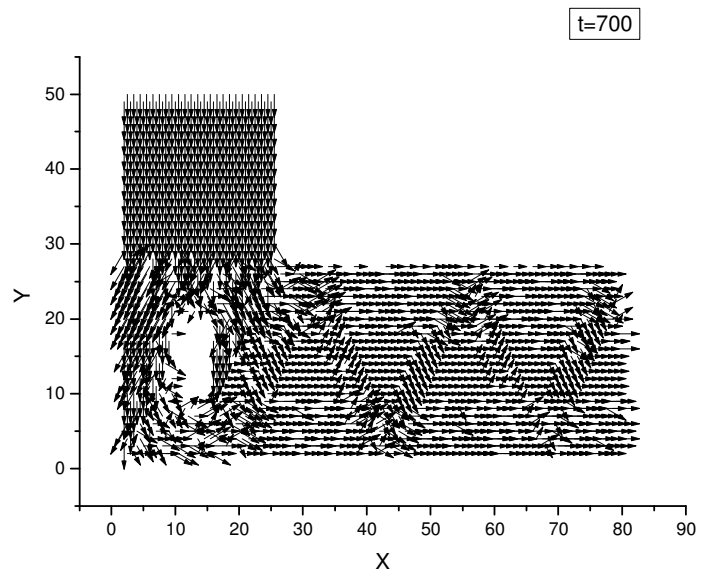


Figura 5.31: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 10$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo.

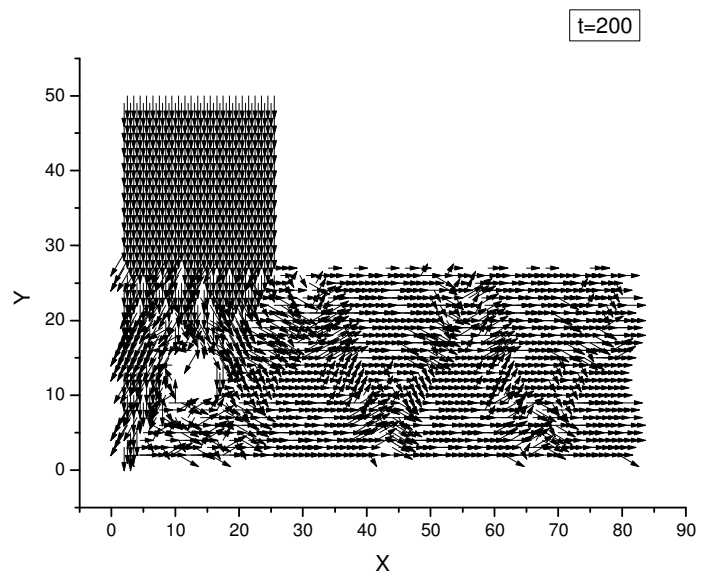


Figura 5.32: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 5$ , após 200 passos.

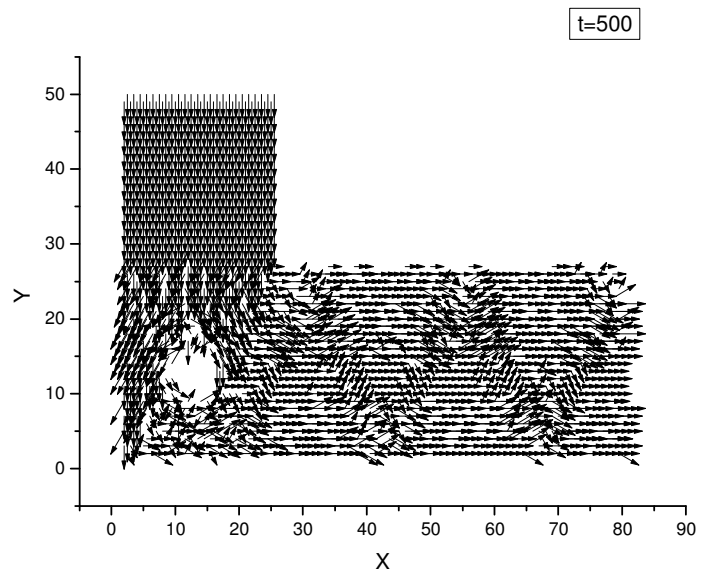


Figura 5.33: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada dois intervalos de tempo.

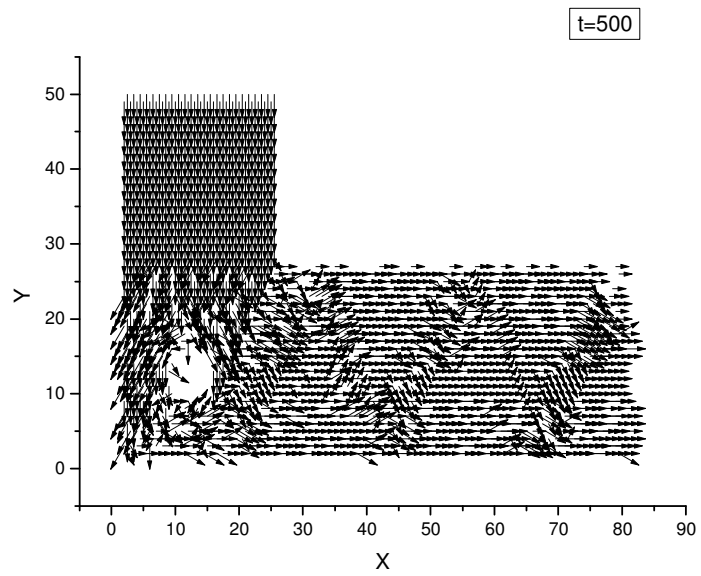


Figura 5.34: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 5$ , após 500 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada três intervalos de tempo.

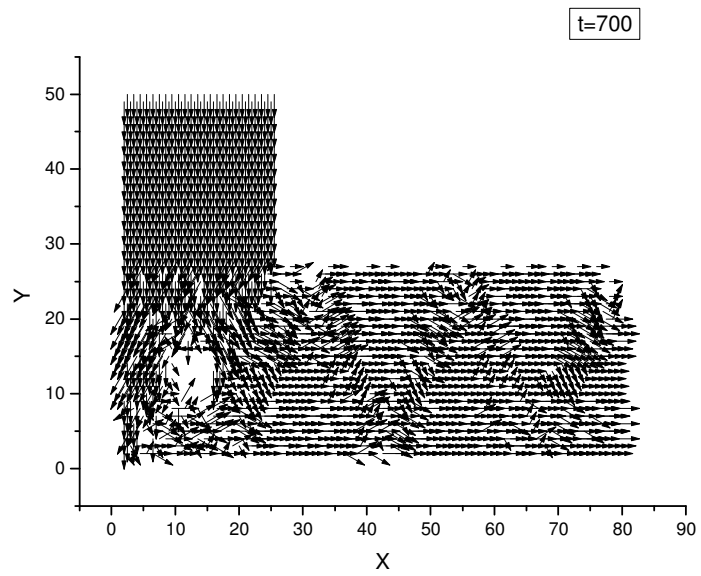


Figura 5.35: Campo de velocidades em um trecho em forma de  $L$  com barreira  $5 \times 5$ , após 700 passos, variando a pressão, com partículas injetadas a cada quatro intervalos de tempo.

# Capítulo 6

## Comentários Finais

Apresentaremos neste Capítulo, comentários, análises e comparações dos resultados obtidos no Capítulo anterior com resultados já publicados, inclusive com outra técnica.

Na primeira simulação, duto linear e horizontal, Fig.5.9, observamos o aparecimento de turbulência antes e depois da barreira, que não representa a realidade de um escoamento. Este fato se deve as condição de fronteira periódicas, que não retratam a realidade do fluido ao chegar na fronteira da rede. Assim na Fig.5.10, foi utilizada a condição de fronteira sólida, isto é, a partícula passa a obdecer regras de colisão. Observamos que obtemos a ter uma melhor representação do comportamento do fluido. Esta figura mostra que mesmo o domínio, o objeto e as condições de fronteiras sendo simétricas, o escoamento não apresenta simetria. Fearn [19] e Foumeny [20] apresentam exemplos desse fato.

Notamos em todas as simulações o aparecimento das esteiras de vórtices de von Kármán [4], que surgem quando um objeto está imerso em um fluido em movimento. Acima de um certo número de Reynolds, o escoamento à jusante do objeto se torna transiente. Vórtices surgem a partir das extremidades opostas do objeto, alternadamente. Apesar de não possuir uma solução estacionária, esse escoamento possui uma condição periódica no tempo. Esses vórtices aparecem em simulações numérica das Eqs. de Navier-Stokes pelo método de diferenças finitas, Fig6.1[8], ou mesmo utilizando autômatos Fig.6.2[21].



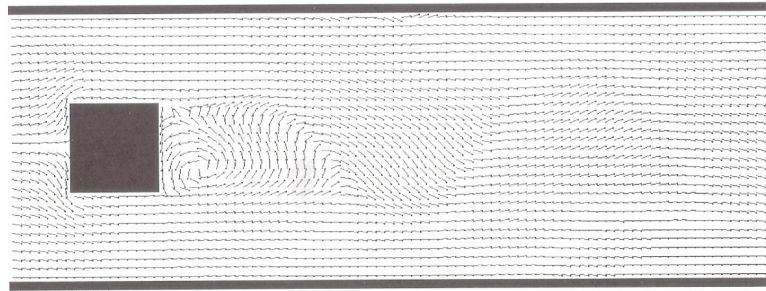


Figura 6.1: Esteira de Vórtices de von Kármán, utilizando método de diferenças finitas, por Armando Fortuna [8].

Observamos, também, que essa periodicidade do movimento após contornar a barreira começa a dissipar na Fig.6.1, o que não ocorre em nossa simulação, mesmo após grandes intervalos de tempo, pois não estamos utilizando termos dissipativos.

Concluimos que é preciso ter certeza de que as condições de fronteira são aplicáveis a um dado escoamento, antes de impor tais condições. Caso isso não seja feito, poderemos encontrar resultados incompatíveis com o problema real. Assim, o código-fonte passa sem problemas pela etapa de verificação, mas não pela validação dos resultados.

Para o duto em forma de "L", com ou sem barreiras, não encontramos simulações parecidas em outras literaturas, para compararmos com os nossos resultados. Contudo, conseguimos reproduzir o comportamento esperado do escoamento de um fluido, mas com algumas contribuições não desejadas. No escoamento sem barreira, foi observado uma turbulência próximo ao canto superior do trecho, que acredita-se ser devido as condições de colisão com a fronteira que devem ser melhoradas para descrever corretamente este ponto. Esta interferência não deveria ter aparecido, assim para retirá-la devemos melhorar as condições de colisão com a fronteira da rede ou o modelo em si.

Para o duto em forma de "L" com barreira observamos que, independente das dimensões da barreira, o comportamento era similar, em todas as simulações. Foram obtidas os vórtice de von Kármán neste caso, apesar de nossa rede não ser mais simétrica. Na rea-

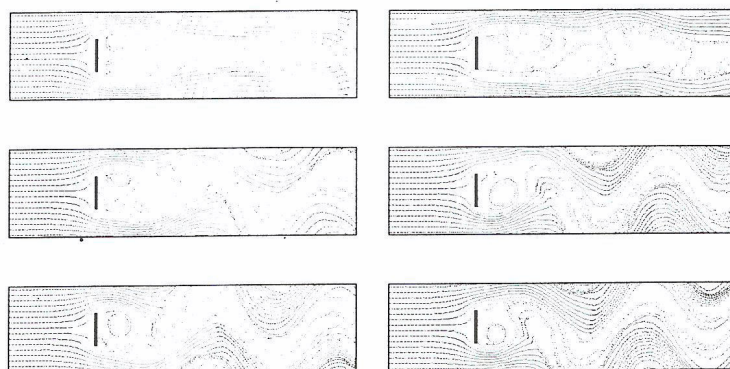


Figura 6.2: Esteira de Vórtices de von Kármán, utilizando método de gás de rede, obtido na ref.[21].

lidade, o trecho horizontal do duto é simétrico e, portanto, é de se prever o aparecimento de tais vórtices.

Alteramos, também, a pressão em nosso duto em forma de " $L$ ", e o que foi verificado é que a representação gráfica, no escoamento já estável, não se modifica em relação as outras representações com o mesmo tipo de barreira. A única diferença significativa é a quantidade de atualizações, que cresce ao aumentarmos o intervalo de tempo que as partículas entram na rede. Este comportamento, também, é esperado, pois observamos diariamente que se gasta mais tempo para passarmos água por uma mangueira vazia, tendo baixa pressão.

Nós observamos que o modelo de gás de rede utilizado por nós é de fácil simulação em relação as soluções numéricas das Equações de Navier-Stokes. No entanto, o modelo é muito susceptível as condições de fronteira, onde pode-se observar que qualquer pequena modificação nestes termos alterava significativamente nossos resultados.

Para obtermos melhores resultados teríamos que alterar as condições de fronteira, respeitando-se, sempre, as leis físicas relacionadas ao fluido. Vale salientar que várias tentativas foram feitas sem sucesso.

O tempo de simulação médio que, em um computador Celeron M, de 1.8GHz, leva para compilar o programa utilizado nestas simulações, em Fortran, com 800 atualizações é de, aproximadamente, 30 segundos.

Com as condições utilizadas neste trabalho, o método de gás de rede é difícil de ser aplicados aos rios da região Norte do Brasil, pois eles possuem uma diversidade de formas, de modo que teríamos que modificar o programa para reproduzir cada fronteira do rio manualmente. Porém, se condições de colisão forem corretamente aplicadas, poderemos obter uma boa previsão do comportamento dos rios, com uma fácil simulação e pouco tempo de compilação.

Um fato interessante é que embora a turbulência seja um fenômeno de nossa experiência diária, é extremamente difícil encontrar soluções para esta classe de problemas. Um prêmio de U\$ 1.000.000 foi oferecido em Maio de 2000 pelo Instituto de Matemática Clay para qualquer um que fizer progressos substanciais na direção de uma matemática teórica que possa ajudar a entender este fenômeno.

# Referências

- [1] [http://www.amarribo.org.br/mambo/index.php?option=com\\_content&task=view&id=2066&Itemid=57](http://www.amarribo.org.br/mambo/index.php?option=com_content&task=view&id=2066&Itemid=57)
- [2] J. V. Neumann and A. W. Burks. Theory of Self-Reproducing Automata. University of Illinois Press, Champaign, IL, 1966.
- [3] Jesus, R. A., Aplicação de Autômatos Celulares na Propagação de Ondas, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia de Construção Civil, Boletim Técnico – Série BT/PCC, 2002.
- [4] Potter, M. C., Mecânica dos Fluidos, 2004, ed. Thomson.
- [5] Young, D. F., Uma Introdução Concisa à Mecânica dos Fluidos, 2005, ed. Edgard Blücher.
- [6] L. M. H. Navier, Mémoires de l'Académie Royale des Sciences, **6**, 389-440 (1827).
- [7] G. G. Stokes, Proc. Cambridge Phil. Soc., **8**, 287-319 (1845).
- [8] Fortuna, A. O., Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos, 2000, edusp.
- [9] Miranda, L.B., Princípios de Oceanografia Física de Estuários, 2002, edusp.
- [10] Symon, K. R., Mecânica, 1982, editora Campus.
- [11] Wislicenus, G. F. Preliminary Design of Turbopumps and Related Machinery, NASA, Reference Publication 1170, 1986

- [12] Kristal, F.A., e Annett, F.A., Pumps: Types, Selection, Installation, Operation and Maintenance, MacGraw-Hill, New York, 1953
- [13] Garay, P. N., Pump Application Desk Book, Fairmont Press, Lilburn, Georgia, 1990.
- [14] Frisch, U., Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation, Physical Review Letters **56**:14, Abril, 1986.
- [15] R. Rucker and J. Walker. Introduction to CelLab, <http://www.fourmilab.ch/cellab/>, 2003.
- [16] Kremer, G. M., Uma Introdução à Equação de Boltzmann, edusp, 2005.
- [17] Wolfram, S., Cellular automaton fluids 1: Basic theory, Journal of Statistical Physics **45**:3, Novembro, 1986.
- [18] Schiozer, D., Mecânica dos Fluidos, segunda edição, LTC.
- [19] Fearn, R. M., Nonlinear Flow Phenomena in a Symmetric Sudden Expansion. J. Fluid. Mech., **211**-595, 1990.
- [20] Fomeny, E. A., Bifurcations of Incompressible Flow Through Plane Symmetric Channel Expansions, Comp. Fluids, **25**-335, 1996.
- [21] Chopard, B., Droz, M., Cellular Automata Modeling of Physical Systems.