



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

SIMULAÇÃO DE FLUIDOS EM UM MEIO POROSO ATRAVÉS DE AUTÔMATOS
CELULARES DE GÁS NA REDE

por

Rafael Moura Azevedo

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

Banca Examinadora:

Prof. Maurício D. Coutinho Filho (Orientador-UFPE)
Prof. Giovani Lopes Vasconcelos (DF - UFPE)
Prof. Liacir dos Santos Lucena (DFTE - UFRN)

Recife - PE, Brasil
Fevereiro - 2007

Azevedo, Rafael Moura

Simulação de fluidos imiscíveis em meios porosos através de autômatos celulares de gás na rede / Rafael Moura Azevedo. – Recife : O Autor, 2008.

xxii, 128 folhas : il., fig.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Depto. de Física, 2008.

Inclui bibliografia .

1.Mecânica de fluidos. 2. Fluidos. 3. Meios porosos. 4. Autômato celular de gás na rede. 5. Dinâmica de interface. I. Título.

532

CDD (22.ed.) DF2008-09



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Rafael Moura Azevedo

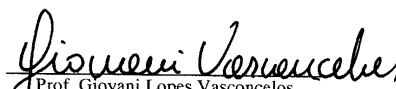
**SIMULAÇÃO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS ATRAVÉS DE
AUTÔMATOS CELULARES DE GÁS NA REDE**

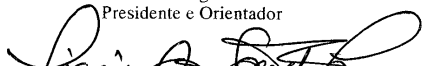
A Banca Examinadora composta pelos Professores Maurício Domingues Coutinho Filho (Presidente e Orientador), Giovani Lopes Vasconcelos, ambos da Universidade Federal de Pernambuco e Liacir dos Santos Lucena, da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, consideram o candidato:

☒ Aprovado com distinção () Aprovado () Reprovado

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos vinte e oito dias do mês de fevereiro de 2008.


Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Presidente e Orientador


Prof. Giovani Lopes Vasconcelos


Prof. Liacir dos Santos Lucena

Aos meus amigos e família.

Agradecimentos

Agradeço ao professor Maurício Domingues Coutinho Filho, meu orientador e amigo, que sempre incentivou intensamente meu trabalho científico.

Agradeço aos meus colegas, e amigos, de laboratório, em particular a Renê R. Montenegro Filho pela sua ajuda inestimável. Agradeço também a Leonardo P. Viana pelas discussões na etapa inicial deste trabalho.

Agradeço aos professores e funcionários do departamento de física, que de uma forma ou de outra ajudaram neste trabalho.

Agradeço aos órgãos financiadores MCT, CNPq, FINEP, CAPES, FACEPE; e programas PRONEX e CT-PETRO.

Agradeço a minha família e amigos por sempre estarem ao meu lado.

Resumo

Neste trabalho, investigamos o escoamento de dois fluidos imiscíveis em meios porosos bidimensionais através de simulação computacional de autômatos celulares de gás na rede. Este tipo de autômata é capaz de reproduzir o comportamento da equação de Navier-Stokes junto com a equação de Laplace para o caso de dois fluidos imiscíveis e, sem aumentar o tempo computacional, consegue implementar condições de contorno complexas. Uma pequena modificação nos possibilita simular o escoamento numa célula de Hele-Shaw, ou seja, um escoamento bidimensional regido pela lei de Darcy. Neste último caso, é possível fazer com que os fluidos tenham viscosidades diferentes e observar alguns dos vários comportamentos possíveis como, por exemplo, a formação do dedo de Saffman-Taylor. O meio poroso foi modelado de duas maneiras. Numa primeira abordagem, blocos formados por quadrados e dispostos de maneira aleatória foi empregado. Neste meio, fizemos escoar um único fluido, regido pela equação de Navier-Stokes do ponto de vista mesoscópico, e obtivemos a lei de Forchheimer do ponto de vista macroscópico, ou seja, quando fazíamos uma média da velocidade hidrodinâmica em uma região que englobava toda a rede considerada. Esta lei é uma generalização da lei de Darcy. Este resultado já foi obtido pela literatura porém empregando um tipo diferente de modelo para o meio poroso. Posteriormente, numa segunda abordagem, realizamos a simulação de uma célula de Hele-Shaw, com contas circulares fixas de raio variável, posicionados de maneira aleatória. Aqui fizemos escoar dois fluidos imiscíveis e nos concentramos na evolução da rugosidade da interface formada entre eles. Qualitativamente, observamos que quando um fluido menos viscoso invade um de maior viscosidade formam-se dedos, como o esperado. Na situação inversa, há uma pequena rugosidade, porém fortemente determinada

pela desordem do meio. Quando os dois fluidos têm a mesma viscosidades, desenvolve-se uma rugosidade fracamente determinada pelos obstáculos o qual satura em torno de um valor médio. Quantitativamente, observamos a existência de leis de escalas e estimamos o expoente da rugosidade, $\alpha \approx 0,53$, e o expoente de crescimento β , que se encontra no intervalo 0,6-0,8. O expoente da rugosidade é próximo aos previstos pelas equações de Edwards-Wilkinson e de Kardar-Parisi-Zhang, porém o expoente de crescimento se distancia, mas as estimativas estão em concordância com diversos resultados experimentais.

Palavras-chave: Fluidos, Meios Porosos, Autômato Celular de Gás na Rede, Dinâmica de Interface

Abstract

In this study, we investigated the displacement of two immiscible fluids in bidimensional porous media by means of models of lattice gas cellular automata. Such an automaton can reproduce the behavior of the Navier-Stokes equation, along with the Laplace equation for the case of two immiscible fluids and, besides, can implement conditions of complex contour without increasing the computational time. A small change in the model allows simulate the flow in a cell of Hele-Shaw, a quasi-Bidimensional flow governed by equations similar to the Darcy's law. In the latter case, it is possible to make the fluids have different viscosities and observe some of the various possible behaviors such as the formation of the Saffman-Taylor fingering. The porous medium is modeled in two ways. In the first approach, a block formed by squares and arranged in a random way was employed. In this way, we did see a single fluid, governed by the Navier-Stokes equation, and got for the macroscopic flow the Forchheimer's law as a generalization of the Darcy's law. This result has been obtained by literature but employing a different type of model for the porous medium. Subsequently, in a second approach, we conducted a simulation of a cell of Hele-Shaw, with circular beads with variable radius, in random places. Here we see two immiscible fluids and focus on the development of the interface roughness formed between them qualitatively, then noticing that when a less viscous fluid invades one of largest viscosity make up fingers, as expected. In the reverse situation, there is a slight roughness, but strongly determined by the chaos of the medium. When the two have the same fluid viscosities, there is a roughness weakly determined by the obstacles which saturates around an average value. Quantitatively, we observe the existence of laws of scales and estimate the exponent of the roughness, $\alpha \approx 0.53$, and the growth exponent of β , which is in the range 0,6-0,8. The expo-

ment of the roughness is next to provided by the Edwards-Wilkinson and Kardar-Parisi-Zhang equations, but the exponent of growth is distant. These results agree with estimates made in various experimental.

Keywords: Fluid Flow, Porous Media, Lattice Gas Cellular Automata, Interface Dynamics

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Autômato Celular de Gás na Rede	4
1.2	Dinâmica dos Fluidos	9
1.2.1	A Equação de Navier-Stokes e a Equação de Euler	10
1.2.2	Número de Reynolds	11
1.2.3	Condições de Contorno	13
1.2.4	A Lei de Laplace	14
1.2.5	A Célula de Hele-Shaw	15
1.3	Crescimento de Interfaces	18
2	Autômato Celular de Gás na Rede	23
2.1	O Modelo de Frisch-Hasslacher-Pomeau	23
2.1.1	Forças e Condições de Contorno	31
2.1.2	Limitações, Problemas e Soluções	33
2.1.3	Um Exemplo	35
2.2	Mecânica Estatística: Processos de Markov	36
2.2.1	Autômatos Celulares	36
2.2.2	Processos de Markov	38
2.2.3	Componentes Ergódicos	40
2.2.4	Distribuição de Fermi-Dirac	42
2.3	Obtenção das Equações Macrodinâmicas	45
2.3.1	Teoria Cinética	45

2.3.2	Equações Microdinâmicas	46
2.3.2.1	O Exemplo do Modelo FHP	49
2.3.3	Aproximação de Boltzmann	50
2.3.4	A Expansão de Chapman-Enskog	51
2.3.5	Distribuição de Equilíbrio até Segunda Ordem	53
2.3.6	Primeira Ordem do Método Chapman-Enskog: A Equação de Euler	56
2.3.7	Segunda Ordem do Método Chapman-Enskog: A equação de Navier-Stokes	60
2.4	Escoamento de Poiseuille	64
2.4.1	Resultado da Simulação	65
3	Modelos para Dois Fluidos	67
3.1	Modelo de Gás na Rede Imiscível	68
3.1.1	Separação de Fases	70
3.1.2	Lei de Laplace	72
3.2	Modelos com Espalhadores para a Célula de Hele-Shaw	76
3.3	Célula de Hele-Shaw com Dois Fluidos Imiscíveis	80
3.3.1	Observações Experimentais	80
3.3.2	Validação do Modelo ILG com Espalhadores	84
3.3.3	Resultados das Simulações	85
3.4	Modelo para o Escoamento em Superfícies Cônicas	91
4	Fluidos em Meios Porosos e Dinâmica de Interfaces Rugosas	95
4.1	Dinâmica de Interfaces Rugosas	96
4.1.1	Auto-Afinidade	96
4.1.2	A Equação de Edward-Wilkinson	97
4.1.3	A Equação de Kardar-Parisi-Zhang	100

4.1.4	Desordem Congelada	103
4.2	Escoamento em Meios Porosos	104
4.3	Simulações com os Modelos ACGR	107
4.4	Simulação de Fluidos Imiscíveis em uma Célula de H-S com Desordem	110
4.4.1	Resultados das Simulações	112
5	Conclusões	121

Lista de Figuras

- 1.1 *Exemplo de um passo de tempo para um modelo de ACGR. Cada seta representa uma partícula de massa unitária movendo-se na direção da seta. Na Fig. 1.1(b) cada partícula se move uma unidade de rede na direção de sua velocidade. A Fig. 1.1(c) mostra o resultado da colisão.* 5
- 1.2 *Ruas de vórtices de von Karman simulado com o ACGR. A figura mostra um escoamento bidimensional com uma chapa linear como obstáculo [21].* 6
- 1.3 *Evolução do autômato descrito no texto. A figura é um parte de uma rede maior. Só consideramos como vizinhos as células de cima, de baixo, da esquerda e da direita. No passo $t = 1$, os vizinhos da célula do meio tem soma igual à 2. Consequentemente, em $t = 2$, esta assume o valor 1. Porém, em $t = 2$, os vizinhos somam apenas 1. Segue que em $t = 3$, a célula do meio assume o valor 0.* 7
- 1.4 *Diferença entre fluidos e sólidos quando submetidos a forças de cisalhamento.* 10
- 1.5 *Forças de coesão cujo balanceamento depende da posição do elemento de fluido.* 15
- 1.6 *Célula de Hele-Shaw[8].* 16
- 1.7 *Gráfico da rugosidade versus o tempo [4].* 19
- 1.8 *Colapso de medidas distintas de um mesmo sistema [4].* 21
- 2.1 *Possíveis colisões para duas partículas com momento total nulo.* 25

- 2.2 *Configurações para o modelo de seis partículas. Cada entrada corresponde a uma mesma classe (n, g_x, g_y). O número de elementos em uma mesma classe está entre parênteses. Configurações para outros valores de (g_x, g_y) podem ser obtido por reflexão. Configuração para $n > 3$ são obtidos trocando partículas com buracos. [30].* 26
- 2.3 *Figura similar a anterior, porém para o modelo de sete partículas. Círculos sólidos representam partículas paradas [30].* 27
- 2.4 *Exemplo da atuação de uma força horizontal. A seta normal indica existência de partículas e a seta larga indica vacância. As demais posições podem ou não ter partículas.* 32
- 2.5 *Obstáculo com condição de contorno de não deslizamento. Note a partícula do sítio do meio voltando para o mesmo lugar, no entanto com o momento invertido.* 32
- 2.6 *Obstáculo com condição de contorno de deslizamento. A partícula do sítio do meio precisa de dois passos para ser refletida.* 33
- 2.7 *Simulação através de ACGR de uma situação em que aparecem as ruas de vórtices de von Karman [21].* 35
- 2.8 *Perfil de velocidade da simulação do escoamento de Poiseuille. Densidade de 3,5 partículas por sítio* 66
- 3.1 *Colisão com cores. As setas simples e duplas indicam a cor vermelha e azul respectivamente. Note o que acontece ao sítio central.* 68
- 3.2 *Separação de fases* 70
- 3.3 *Gráfico da curva $D=0$ obtida pelo aproximação de Boltzmann e estimativas "empíricas"(círculos) no plano da concentração θ e densidade reduzida f (partículas por célula)[16].* 71
- 3.4 *Simulação para obtenção da lei de Laplace. Rede de 64×64 sítios com uma densidade média de 4,9 partículas por sítio. Note o ruído na interface.* 73

- 3.5 *Os gráficos mostram a densidade de partículas por sítios versus sua posição no plano. As duas figuras mostram os mesmo resultado, porém com ângulos diferentes. A parte central corresponde a bolha azul. A densidade média dentro da bolha é de 5,29 partículas por sítio, enquanto que fora, é de 5,25. Na interface, a densidade chega a cair até 5,14. A rede tem dimensões de $100 \times 100\sqrt{3}/2$ unidades de rede, e as médias foram obtidas com 5 mil passos.* 74
- 3.6 *A verificação da lei de Laplace. Densidade inicial é de 4,9 partículas por sítio e raios variando de 40 a 400.* 75
- 3.7 *Gráfico das tensão superficial versus a densidade de partículas reduzidas (densidade por célula). Os quadrados são as estimativas que obtemos e os triângulos são as estimativas encontradas em [16]* 75
- 3.8 *Simulação do fenômeno da molhabilidade (wettability). Na figura da esquerda o fluido molhante é o vermelho e na da direita é o verde. O sistema já se encontra em equilíbrio. Note a diferença do ângulo de contato.* 76
- 3.9 *O efeito do espalhador. Este atua invertendo as velocidades de cada partícula no sítio.* 77
- 3.10 *Perfil de velocidade para o escoamento similar ao de Poiseuille, porém realizado com o modelo de espalhadores. A taxa de espalhadores é de 0,005, com densidade de 3,5 partículas por sítios e taxa de força de 0,02. O fitting corresponde a Eq. (3.11)* 79
- 3.11 *Competição de duas protuberâncias conduzindo a emergência de um único dedo estável. As figuras são retiradas do mesmo experimento em tempos sucessivos [43].* 82
- 3.12 *Série temporal para padrões de dedos com baixo contraste de viscosidade [44].* 83

- 3.13 *Seqüência de um experimento em que ocorre uma formação de bolha, rapidamente seguida de uma agregação em outro dedo. O experimento não teve resolução temporal para ver a bolha separada [41].* 83
- 3.14 *Verificação da lei de Laplace para o modelo de ILG com espalhadores. A densidade é de 4,9 partículas por sítio, a taxa de espalhadores é de 0,001.* 84
- 3.15 *Simulação de um fluido mais viscoso empurrando um menos viscoso. A taxa de espalhadores é de 0,008 para o fluido vermelho e 0,001 para o azul. A velocidade é de 0,029* 85
- 3.16 *Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior. A rede tem dimensões de $3000 \times 500 \sqrt{3}/2$ unidades de rede. A taxa de força é de 0,0001.* 86
- 3.17 *Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior. A rede tem dimensões de $3000 \times 500 \sqrt{3}/2$ unidades de rede. A taxa de força é de 0,0005.* 87
- 3.18 *Continuação da simulação da figura anterior. Note as semelhanças com a Fig. 3.11.* 88
- 3.19 *Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior para um valor pequeno de B. Rede com dimensões de $6000 \times 2000\sqrt{3}/2$ unidades de rede. A velocidade média é de 0,029* 89
- 3.20 *Continuação da simulação da figura anterior. Note a formação de bolhas e reagregação de algumas delas por outro dedo.* 90
- 3.21 *Construção de uma rede triangular inscrita no cone a partir de um plano: recorte a área hachurada da figura a esquerda e faça um cone colando os pontos da extremidade de uma mesma linha (por exemplo, cole A com A').* 92

- 3.22 *A diferença do vetor velocidade da mesma partícula quando esta é representada em A ou em A'. A diferença só existe porque estamos vendo uma representação do cone no plano e desaparece quando fazemos a construção descrita no texto.* 93
- 4.1 *Floco de neve de Koch [49].* 96
- 4.2 *Evolução do modelo de Deposição Balística* 101
- 4.3 *Escoamento em um meio poroso bidimensional simulado pelo modelo de 7 velocidades com colisão aleatória. Cada vetor é uma média espaço temporal de 8X8 sítios e 5 mil passos no regime estacionário. A taxa de força é de 0,0002* 108
- 4.4 *Gráfico da taxa de força versus a vazão. Note a adequação com o fitting de uma parábola (linha). Para taxas de força até 0,0004 o gráfico é aproximadamente linear e a lei de Darcy é válida. Para taxas maiores, é necessário fazer uma correção quadrática para esta lei conhecida como equação de Forchheimer.* 109
- 4.5 *Configuração inicial típica. Esta rede em particular possui dimensões de 5000 X 2500 sítios.* 113
- 4.6 *Formação de estruturas dendríticas quando um fluido menos viscoso invade um de maior viscosidade. A dimensão da rede é de 5000 X 2500 sítios. A força é apenas aplicada em uma faixa na região da esquerda. Nas regiões esbranquiçadas a simulação não é válida por causa da rápida variação na densidade e de seu baixo valor (os fluidos se tornam miscíveis nestas regiões).* 114
- 4.7 *Invasão de um fluido mais viscoso em um de menor viscosidade. As forças viscosas dominam as forças capilares. Note como a interface tende a se estabilizar. A rugosidade é da ordem da dimensão dos obstáculos. A dimensão desta rede é de 5000 X 2500 sítios e a taxa de força aplicada é de 0,0003.* 115

- 4.8 *Simulação de um fluido invasor de mesma viscosidade para a rugosidade saturada. Esta rugosidade é maior do que a dimensão típica dos obstáculos. A rede possui dimensões de 5000 X 2500 sítios e a taxa de força é de 0,0003. Abaixo é aplicado o algoritmo que determina a localização da interface.* 116
- 4.9 *Dependência de w com o tempo para simulações de larguras $\sqrt{3}/2(1500, 2500, 4000)$ (vermelho, preto e azul respectivamente). Cada ponto do gráfico é está separado do seu vizinhos em 1000 passos de tempo. Note que as três simulações têm o mesmo w_{sat}* 117
- 4.10 *Dependência de $w_l(t)$ com o tempo para as janelas de tamanhos: $(\sqrt{3}/2)400$ (verde), $(\sqrt{3}/2)800$ (vermelho), $(\sqrt{3}/2)1600$ (preto), $(\sqrt{3}/2)3200$ (lilás) e $(\sqrt{3}/2)4000$ (azul).* 117
- 4.11 *Resultado de w para a simulação na mesmas condições da simulação de tamanho $L = 2500$ da Fig. 4.9, porém os pontos estão separados de seus vizinhos por 50 passos de tempo. Existem diferentes tipos de transientes. Até o passo 1500, o enrugamento é intrínseco ao modelo de ILG, pois acontece antes da interface se aproximar dos obstáculos. Segue-se uma pequena saturação quando a interface ainda está longe dos obstáculos. A explicação do porque aparece esta primeira saturação e de seu valor ainda necessita ser investigada com maior profundidade. De 2000 a 10 mil passos se dá o contato com os primeiros obstáculos e é caracterizado por um rápido enrugamento. Por fim, chega-se ao estágio de interesse para a estimação de β , pois é o equivalente ao acontece nos experimentos e vai do passo 10 mil até o 20 mil.* 118

- 4.12 *Gráfico de C_l versus l (correlação altura-altura versus a distância) para $L = 2500\sqrt{3}/2$. A inclinação da reta traçada corresponde a uma estimativa do valor do expoente de rugosidade $\alpha \approx 0,53$. Enfatizamos que a correlação "satura" para $l > 100$ com valores de $C(l)$ compatíveis com os observados para w_{sat} na Fig. 4.9.*

CAPÍTULO 1

Introdução

O escoamento de fluidos (líquidos e gases) em meios porosos naturais ou matrizes porosas artificiais aparecem nos mais diversos campos das engenharias e das ciências [1, 2], como: engenharia de petróleo, hidrologia de poços subterrâneos, ciência dos solos, engenharias química e civil, biomedicina, ciência dos alimentos, agricultura e metalurgia. Abaixo relacionamos alguns tópicos de pesquisa de relevância atual.

Na indústria do petróleo, por exemplo, as técnicas de extração primária chegam a deixar mais de 50 por cento deste produto no reservatório. Já existem técnicas mais eficientes, porém se espera que a pesquisa continuada neste tema venha a sugerir métodos mais eficazes [3]. Outro tópico é o estudo do escoamento em poços subterrâneos e a restauração de aquíferos contaminados por poluentes. Quanto à engenharia química, existem estudos a respeito de filtração e centrifugação. Na indústria de construção são de grande relevância os fenômenos referentes à transmissão de água pelos materiais utilizados (concreto, tijolos, etc.). Alguns meios porosos de interesse fisiológico são a pele, o cabelo, os dentes e os pulmões.

Todos estes são fenômenos bastante complexos. O espaço poroso é a porção do material não ocupado por matéria [1]. Apenas poros conectados podem servir como condutores e têm as mais diferentes geometrias e distribuições. Além disto, há casos em que o meio é deformável, a exemplo de alguns materiais de interesse fisiológico como a pele. O escoamento pode envolver mais de um fluido, imiscíveis ou não, onde atuam as mais diversas forças como o empuxo, a gravidade, as forças capilares e as forças viscosas [2].

A interface formada por fluidos imiscíveis apresenta padrões diversos e depende, dentre outros fatores, da diferença de viscosidade, densidade e do fluido "molhante", variando de in-

terfaces compactas à formação de dedos viscosos, passando ainda por situações intermediárias com padrões fractais [4, 5, 6, 7, 8]. É de interesse caracterizar este fenômeno a partir do estudo da dinâmica da interface, a qual exhibe leis de escalas e classes de universalidades [4, 8, 9]. Este estudo lança mão de ferramentas analíticas (como mecânica estatística e, em particular, grupo de renormalização) e de métodos computacionais, incluindo modelos de crescimento, autômatos celulares e integração numérica de equações diferenciais [4].

Há diversos métodos e diferentes abordagens na pesquisa do escoamento em meios porosos. Podemos pensar no meio poroso como sendo contínuo e usar leis fenomenológicas, a exemplo da lei de Darcy [1, 10]. Nesta abordagem macroscópica, as características mesoscópicas, como a distribuição dos poros, são resumidas por alguns poucos coeficientes, a exemplo da permeabilidade. A partir dessas equações, pode-se prosseguir com trabalhos analíticos ou utilizar métodos computacionais e comparar os resultados com experimentos.

Uma abordagem mais complexa é descrever o escoamento no meio poroso com toda a complexidade de sua mesoestrutura, através dos princípios gerais da mecânica dos fluidos, em particular a equação de Navier-Stokes. Tal complexidade deixa o estudo analítico intratável e só recentemente, com o aumento do poder computacional, foi possível a obtenção de resultados relevantes nesta linha de pesquisa. Neste contexto, uma das questões fundamentais é como derivar as leis fenomenológicas e quais as suas restrições de aplicabilidade. Por exemplo, é comum usar generalizações de leis para o escoamento de um único fluido em meios porosos para o caso de dois fluidos imiscíveis apesar das dúvidas sobre sua validade. Rothman [11, 12], usando esta abordagem, obteve resultados numéricos indicando situações em que a generalização da lei de Darcy para dois fluidos não seria válida.

A simulação computacional do escoamento de fluidos é um tópico de pesquisa em si próprio. As equações que regem seu comportamento não possuem solução analítica para a grande maioria dos casos. Isto se deve ao fato de que a equação de Navier-Stokes é uma equação diferencial parcial não-linear. A referida equação para fluidos incompressíveis tem tanto des-

taque na matemática, pela sua dificuldade e importância em aplicações, que existe um prêmio de um milhão de dólares para quem fizer progressos substanciais na direção de uma solução da mesma. [13].

Até a década de 80, o uso da integração numérica era o método computacional mais usado no estudo do escoamento de fluidos. Em 1986 [14], uma alternativa de modelagem foi apresentada com base em um Autômato Celular de Gás na Rede (ACGR) capaz de reproduzir o comportamento de fluidos governados pela equação de Navier-Stokes. A novidade veio acompanhada de uma grande excitação e exageros, a ponto de serem publicadas em um artigo no Washington Post (famoso jornal diário americano) afirmações de que o modelo tinha potencial para ser "*one thousand to one million times faster than previous methods*" (mil a um milhão de vezes mais rápido do que os métodos anteriores). Como a Guerra Fria ainda existia, o Washington Post ainda comentou que o Departamento de Defesa Americano dos Estados Unidos ponderou sobre a necessidade de ser classificado como algo que deveria ficar fora das mãos soviéticas.

Exageros a parte, deu-se prosseguimento a pesquisa nesta área chegando-se a conclusões mais realistas das vantagens e desvantagens desta modelagem. Sua eficiência, comparada com a integração numérica, depende da simulação em questão e dos recursos computacionais disponíveis. Uma das grandes vantagens dos ACGR é a possibilidade e a grande facilidade da implementação do processamento paralelo. Outra vantagem é a sua facilidade em lidar com geometrias complexas, tornando o modelo especialmente adequado para o escoamento em meios porosos.

Nesta dissertação, serão apresentados alguns resultados do uso do ACGR. Em particular, discutiremos os resultados da simulação do escoamento de dois fluidos imiscíveis em uma célula de Hele-Shaw com desordem congelada, analisando a dinâmica da interface formada. A dissertação está organizada como se segue:

No resto deste Capítulo são apresentados os modelos de ACGR resumidamente, feita uma

revisão de dinâmica dos fluidos e discutido rapidamente o comportamento de escala observado no crescimento da interface de alguns modelos.

No segundo Capítulo é apresentado em detalhes o modelo FHP [14], seguida da dedução das equações hidrodinâmicas a partir da microdinâmica dos modelos de ACGR [15, 16, 17, 18]. Por fim, uma simulação ilustra estes modelos.

No terceiro Capítulo são apresentadas as extensões do modelo FHP para simular dois fluidos imiscíveis (modelo de *immiscible lattice gas*, ou ILG [19]), para o escoamento na célula de Hele-Shaw (modelos com espalhadores [20]) e para o escoamentos em superfície de um cone. Acreditamos que a junção das duas primeiras extensões nunca foi feita antes na literatura e com esta observamos de maneira consistente as conhecidas "instabilidades de Saffman-Taylor"[5]. A última extensão é original até onde sabemos.

O quarto Capítulo lida com os meios porosos e o enrugamento de interfaces. A questão do enrugamento de interfaces é aprofundada e algumas simulações com ACGR para meio porosos são apresentadas. É neste Capítulo que apresentamos os resultados das simulações de dois fluidos imiscíveis em uma célula de Hele-Shaw com desordem.

Por fim, o Capítulo de conclusão explicita os resultados originais e fala das perspectivas do grupo de pesquisa.

1.1 Autômato Celular de Gás na Rede

Observando os diversos líquidos e gases, percebe-se que o comportamento deles depende muito pouco da natureza das partículas que o compõem. Os constituintes de um óleo, por exemplo, interagem de maneira bem diversa se comparados com os da água com suas pontes de hidrogênio, ou com os de algum gás rarefeito. Entretanto, seu comportamento macroscópico é muito similar. Tendo isto em mente, podemos questionar se não é possível criar modelos de partículas simples, particularmente do ponto de vista de computacional, cujo comportamento seja similar

ao de fluidos reais. Por exemplo, poderia haver um modelo de fluidos tão simples a ponto de só existirem partículas movendo-se em um espaço discreto como os vértices de uma rede triangular, com massas idênticas e com um pequeno número de velocidades possíveis e, no entanto, exibirem um comportamento macroscópico semelhante ao de um fluido real? Esta é a idéia da motivação primária de simular fluidos através do modelo de Autômatos Celulares de Gás na Rede [16, 17].

Um desses modelos que obteve sucesso é o agora denominado FHP [14] (nome devido aos seus criadores: Frisch, Hasslacher e Pomeau). As partículas vivem numa rede hexagonal como mostrado na Fig. 1.1, a massa e o módulo da velocidade é a mesma para todas as partículas e as direções possíveis das velocidades correspondem às das arestas dos triângulos da rede. O modelo é inicializado de maneira que no mesmo vértice não pode haver mais de uma partícula com a mesma velocidade. A cada passo, o sistema muda através do processo de propagação e colisão. A propagação é mostrado na Fig. 1.1(b), onde cada partícula move-se uma unidade de rede na direção de sua velocidade. A colisão é ilustrada na Fig. 1.1(c) e ocorre quando mais de uma partícula chega ao mesmo vértice. Essas partículas podem, então, mudar de velocidade, desde que haja conservação da soma vetorial total das velocidades no mesmo vértice, ou seja, desde que o momento seja conservado. Note que, tanto na colisão quanto na propagação, o número de partículas não varia implicando a conservação da massa.

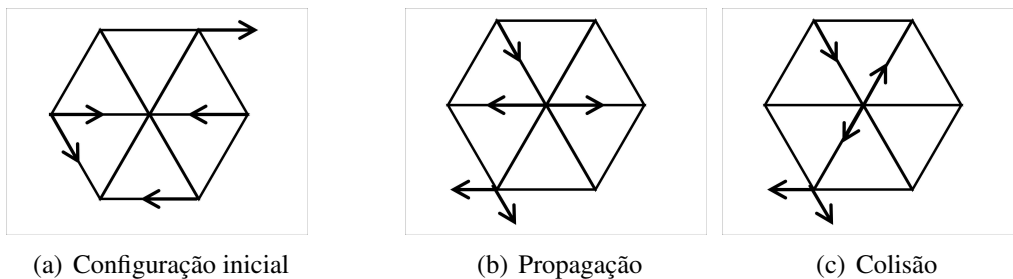


Figura 1.1 Exemplo de um passo de tempo para um modelo de ACGR. Cada seta representa uma partícula de massa unitária movendo-se na direção da seta. Na Fig. 1.1(b) cada partícula se move uma unidade de rede na direção de sua velocidade. A Fig. 1.1(c) mostra o resultado da colisão.

Assim como nos fluidos reais, não enxergamos seus constituintes isolados, pois nosso in-

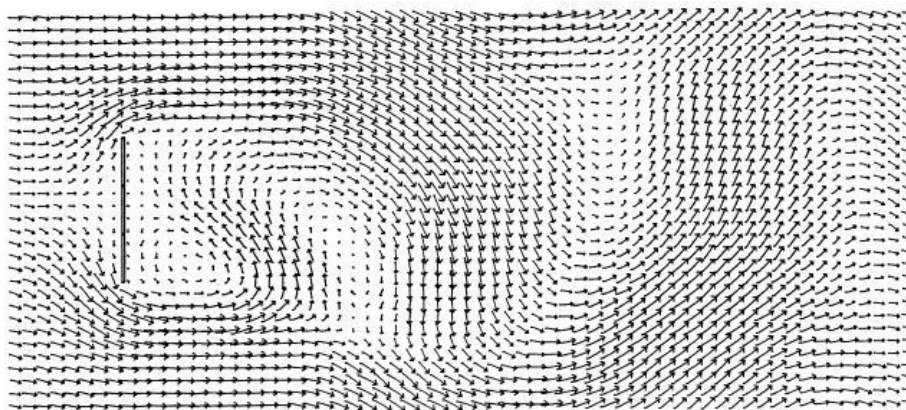


Figura 1.2 Ruas de vórtices de von Karman simulado com o ACGR. A figura mostra um escoamento bidimensional com uma chapa linear como obstáculo [21].

teresse é na descrição do comportamento macroscópico do sistema. Quando observamos o escoamento da água, por exemplo, a sua velocidade e densidade são uma espécie de média sobre as quantidades pertinentes de seus constituintes. Da mesma maneira, para obtermos a velocidade e a densidade no contexto do modelo, fazemos médias do número de partículas e do momento de maneira apropriada.

A Fig. 1.2 mostra um pouco do poder de simulação do autômato celular. Esta figura foi extraída de um artigo de 1987 [21]. Este escoamento é forçado da esquerda para a direita. O número de Reynolds, número adimensional que indica o nível de turbulência, é próximo a 88, alto o suficiente para formar um padrão de escoamento não estacionário conhecido como ruas de vórtices de Bernard-von Kármán. Esta simulação está de acordo com o esperado de algumas situações reais ou obtidos por outros métodos computacionais tradicionais.

Cabe aqui entender o que vem a ser um autômato celular. Uma possível definição é que um autômato celular é um sistema dinâmico constituído de células em uma rede, com um número finito de estados, evoluindo em passos discretos a partir de regras simples que envolvem os sítios e seus vizinhos. Um exemplo concreto seria uma página de caderno quadriculado (uma rede regular) em que se colocasse em cada quadrado o número 0 ou 1 (valores discretos) e que todo dia (tempo discreto) apagássemos e reescrevêssemos todos os quadrados de acordo

com a soma dos números em seus vizinhos (regras de evolução). Se esta soma ultrapassar 2, escrevemos 1 e, caso contrário, escrevemos 0. A evolução dele está ilustrado na Fig. 1.3.

0	1	1	0	0	0	0	1	0
0	0	0	1	1	0	1	0	0
0	1	0	1	0	1	1	1	0
(a) $t = 1$			(b) $t = 2$			(c) $t = 3$		

Figura 1.3 *Evolução do autômato descrito no texto. A figura é um parte de uma rede maior. Só consideramos como vizinhos as células de cima, de baixo, da esquerda e da direita. No passo $t = 1$, os vizinhos da célula do meio tem soma igual à 2. Consequentemente, em $t = 2$, esta assume o valor 1. Porém, em $t = 2$, os vizinhos somam apenas 1. Segue que em $t = 3$, a célula do meio assume o valor 0.*

Agora podemos mostrar que o nome do modelo é apropriado, ou seja, que os modelos de ACGR são, de fato, um autômato celular. Basta considerar que cada vértice contém seis células, uma para cada direção. Em cada célula há no máximo uma partícula, pois não se pode ter mais de uma partícula com a mesma direção da velocidade por vértice. Desta forma, os valores que cada célula assume é 0 ou 1. Estes são os valores discretos. A evolução se dá pela interação com seus vizinhos (a propagação) ou com as células de um mesmo vértice (a colisão). E, por fim, o tempo é discreto.

Por volta de 1950, os autômatos celulares foram introduzidos por matemáticos como John von Neumann, Stanislas Ulam e Konrad Zuse. Os dois primeiros propuseram que, sob certas condições, o comportamento coletivo do sistema poderia ser suficientemente complexo para simular algumas das características de sistemas reais como os sistemas biológicos [22]. Ulam foi talvez o primeiro a propor que se poderia usar o computador como uma espécie de simulador analógico. Isto é diferente da integração numérica das equações que regem um determinado fenômeno. Sendo mais específico, dado uma equação diferencial, seria possível construir um modelo, como um jogo, de maneira que através de experimentos com ele, poderíamos inferir resultados das equações sem, contudo, resolvê-las explicitamente. Zuse publicou em uma

monografia [23], publicada em 1969, algumas tentativas de autômatos celulares que reproduzissem equações diferenciais como as dos fluidos, ou da eletrodinâmica clássica e até mesmo da mecânica quântica. O modelo imaginado para fluidos tem algumas características semelhantes aos modelos de ACGR que apareceram depois. Ele foi ainda mais longe quando afirmou que o próprio universo poderia ser um gigantesco autômato celular.

O primeiro ACGR foi proposto em 1973 [24] por Jean Hardy, Olivier de Pazzis e Yves Pomeau e recebeu o nome de HPP (iniciais dos sobrenomes de seus criadores). As partículas se localizam nos vértices de uma rede quadrada e a dinâmica conserva massa e momento. Mostrou-se que as equações macroscópicas eram similares as da hidrodinâmica, porém anisotrópicas. Finalmente, mais de dez anos depois, em 1986, Uriel Frisch, Brosl Hasslacher e Yves Pomeau construíram um modelo similar ao HPP, porém numa rede com simetria hexagonal e obtiveram uma hidrodinâmica isotrópica, sendo então considerado como um modelo adequado para simular o comportamento de fluidos governado pela equação de Navier-Stokes. Este tipo de modelo ficou conhecido por FHP. Os fundamentos teóricos foram explicados logo depois, em 1986, por Wolfram [18], e em 1987 por Frisch *et al.* [15].

Os principais motivos que levaram os modelos de ACGR como o FHP a terem sucesso foram: i) que a dinâmica destes conservam massa e momento e ii) que a rede possui simetria suficiente para assegurar a isotropia da equação. A questão da conservação de quantidades é tão crucial que, se por acaso existir conservação de outra quantidade não pertinente, o comportamento macroscópico pode ser completamente diferente. A estas quantidades chamou-se de invariantes espúrias. A simetria aparece por meio de uma quantidade que precisa ser isotrópica para que a equação herde esta isotropia (mais precisamente, esta quantidade é um tensor de quarta ordem que aparece quando se descreve a dinâmica macroscópica a partir da microdinâmica). Voltaremos a este assunto em detalhes no Capítulo 2.

O método de *Lattice Boltzmann* é herdeiro direto do modelo exposto acima. A idéia inicialmente era apenas a de trocar as partículas pelas probabilidades da existência desta em de-

terminado sitio [25]. No modelo FHP, por exemplo, ao invés de em cada vértice termos seis variáveis que só assumem os valores 0 ou 1, teríamos seis números reais. Isto faz com que as médias sejam feitas de maneira mais eficiente, ou mesmo que sejam desnecessárias. É por este motivo que o método *Lattice Boltzmann* possui pouco, ou nenhum ruído, diferentemente do autômato celular de gás na rede. Mas é também por este motivo que pode aparecer instabilidades numéricas. Assim, uma das vantagens do Autômato Celular de gás na Rede é a estabilidade intrínseca ao modelo, já que são booleanas (ou seja, seu valor são zero ou um).

Extensões ao modelo foram criadas para englobar fenômenos envolvendo dois fluidos [19] e para o escoamento tridimensional. Além disto, para os dois métodos, há diversas generalizações e aplicações a outros fenômenos que lembram as tentativas de Zuse. Para o ACGR, temos aplicações para a magnetohidrodinâmica, reações químicas, mecânica quântica, entre outras. Para o método *Lattice Boltzmann* já se conseguiu simular o que foi citado para o autômato celular, assim como as equações de Maxwell. Referências a estas diversas podem ser encontradas em [17].

1.2 Dinâmica dos Fluidos

A dinâmica dos fluidos, como o nome sugere explicitamente, consiste no estudo do movimento dos fluidos [26]. A definição de fluidos engloba todos os líquidos e gases. A principal diferença entre sólidos e fluidos está na forma como estes reagem às forças tangenciais ou de cisalhamento como mostrado na Fig. 1.4 [27]. O objeto sólido sofre uma deformação até que suas forças internas equilibrem a força aplicada, estabelecendo uma nova situação estacionária. Por outro lado, quando uma força de cisalhamento é aplicada a um fluido, este se deforma sem limites, ou seja, passa a escoar.

Pode-se considerar um fluido como um contínuo. Neste contexto, suas equações são dedutíveis de considerações puramente macroscópicas e fenomenológicas. Na realidade, quando se

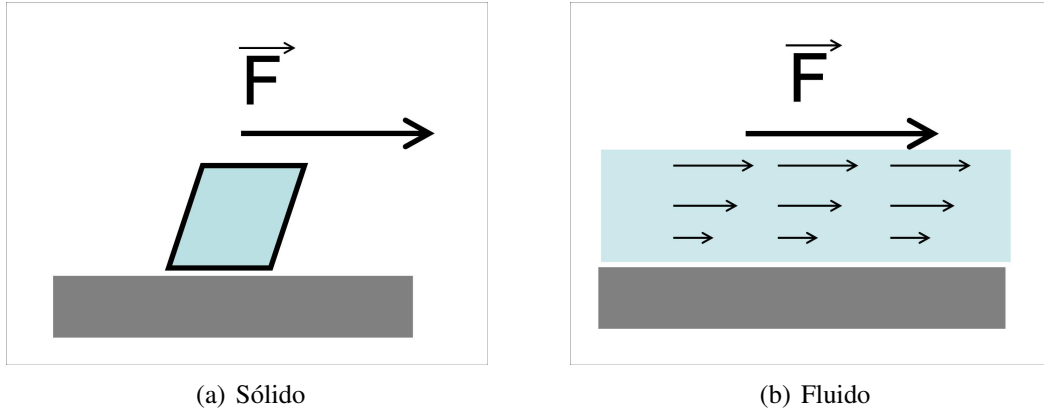


Figura 1.4 Diferença entre fluidos e sólidos quando submetidos a forças de cisalhamento.

pensa desta maneira, o que se considera muito pequeno contém um número muito grande de partículas. Nesta seção, abordaremos a descrição macroscópica dos fluidos.

1.2.1 A Equação de Navier-Stokes e a Equação de Euler

O escoamento incompressível de fluidos viscosos newtonianos é descrito pela equação de Navier-Stokes [26, 27]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (\text{Navier-Stokes}) \quad (1.1)$$

junto com a equação da continuidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.2)$$

onde o símbolo ∇ significa o operador nabla, $\mathbf{u}$ é a velocidade, p é a pressão, ρ é densidade de massa constante e ν é a viscosidade cinemática. Note que a não linearidade da equação de Navier-Stokes está no termo $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$. Se multiplicarmos a Eq. (1.1) por ρ sua interpretação é

evidente. De fato, examinando a equação abaixo:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (1.3)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade (perceba que $\nu = \mu/\rho$), percebemos que esta é uma versão para meios contínuos da segunda lei de Newton. O lado esquerdo representa a variação do momento do elemento do fluido e o lado direito é a força exercida sobre o elemento do fluido. O termo $-\nabla p$ é o gradiente de pressão e o termo $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$ diz respeito a contribuição viscosa à força. Note também que a Eq. (1.2) trata da conservação de massa quando a densidade é constante (fluido incompressível), ou seja, um caso especial da equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (\text{Continuidade}) \quad (1.4)$$

O que diferencia os diversos fluidos quando descritos pelas equações acima (por exemplo, a água ou o ar) é o seu coeficiente de viscosidade [26, 17] ($\nu_{\text{água}} = 10^{-6} m^2 s^{-1}$, $\nu_{\text{ar}} = 1,5 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$).

Um fluido ideal, ou invíscido, é aquele em que não há forças dissipativas. Segue que este tipo de fluido não apresenta viscosidade. Como consequência a sua dinâmica fica descrita pela equação de Euler [26, 27]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (\text{Euler}) \quad (1.5)$$

juntamente com a equação da continuidade (1.2).

1.2.2 Número de Reynolds

Para velocidades suficientemente baixas, o escoamento é laminar. À medida que a velocidade aumenta, este pode passar a ser periódico, com períodos reconhecíveis e, por fim, se torna

turbulento [26]. Porém, seu comportamento não depende somente da magnitude da velocidade. Fluidos diferentes em geometrias parecidas podem apresentar o mesmo tipo de comportamento. Esta é a chamada similaridade dinâmica do escoamento e pode ser predita com o auxílio do número de Reynolds [26, 27, 17]. Mostraremos abaixo que fluidos diferentes para escoamentos numa geometria similar podem ter resultados cuja única diferença é a escala.

As quantidades relevantes são a magnitude típica da velocidade U e um tamanho linear típico L da geometria ou do obstáculo. O fluido fica caracterizado pela viscosidade cinemática ν . Esses três parâmetros têm escala de [espaço/tempo], [espaço] e [espaço²/tempo] respectivamente, e nos sugere a obtenção de um número adimensional. Este é o número de Reynolds:

$$Re = \frac{UL}{\nu}, \quad (1.6)$$

Podemos escalonar todas as quantidades da equação de Navier-Stokes a partir de U e L : $\mathbf{u}' = \mathbf{u}/U$, $\mathbf{x}' = \mathbf{x}/L$, $\nabla' = L \cdot \nabla$, $\nabla'^2 = L^2 \cdot \nabla^2$, $t' = t \cdot U/L$, $P' = P/U^2$ [17]. Colocando estas novas quantidades na Eq. (1.1):

$$\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t'} \frac{U^2}{L} + (\mathbf{u}' \nabla') \mathbf{u}' \frac{U^2}{L} = -\nabla' P' \frac{U^2}{L} + \nu \nabla'^2 \mathbf{u}' \frac{U^2}{L}, \quad (1.7)$$

Ou, dividindo por $\frac{U}{L^2}$:

$$\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t'} + (\mathbf{u}' \nabla') \mathbf{u}' = -\nabla' P' + \frac{1}{Re} \nabla'^2 \mathbf{u}'. \quad (1.8)$$

Escoamentos do mesmo tipo (por exemplo, escoamentos com uma esfera como obstáculo), com diferentes valores para U , L e ν , porém descritos pela mesma equação adimensional, são ditos similares. Tal fato permite a ligação de simulações com os modelos de ACGR com o mundo real.

Uma forma de interpretar o número de Reynolds é considerá-lo como uma medida da mag-

nitude relativa do termo de advecção e da força viscosa:

$$\frac{(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u}}{\frac{1}{Re}\nabla^2\mathbf{u}} \approx \frac{U^2/L}{\nu U/L^2} = \frac{U \cdot L}{\nu} = Re. \quad (1.9)$$

Esta interpretação ajuda a entender em que condições aparecem os vários tipos de escoamento e como classificá-los. Os escoamentos com número de Reynolds pequeno ($Re \ll 1$) são laminares ou estacionários. Aparecimento de ruas de vórtices de von Karman ocorrem com valores intermediários ($Re \approx 100$) e a turbulência acontece para números de Reynolds grandes ($Re \gg 1$). No entanto, o valor exato para o qual um escoamento deixa de ser estacionário depende do tipo de escoamento.

1.2.3 Condições de Contorno

Para um escoamento ser completamente especificado é necessário saber as condições de contorno nas fronteiras da região ocupada pelo fluido, ou o seu comportamento no infinito [27]. As fronteiras costumam ser com objetos sólidos ou com outro fluido imiscível. Por exemplo, água e óleo dentro de um recipiente fechado. Geralmente os sólidos são rígidos e seu movimento não depende do escoamento. No caso de mais de um fluido, a interface formada é móvel e faz parte do problema.

As moléculas do fluido tendem a aderir ao sólido em fluidos viscosos. Neste caso, as velocidades do fluido e do sólido na interface são idênticas. Então, se tivermos um obstáculo sólido parado, a velocidade do escoamento na interface será nula. Esta é chamada de condição de não-deslizamento (*no-slip boundary condition*). Esta condição é confirmada por dados experimentais dentro de uma grande precisão [27].

Seja S a superfície formada pela interface fluido-sólido e seja $\mathbf{u}$ a velocidade do escoamento. Então,

$$\mathbf{u} = 0 \quad \text{em } S. \quad (1.10)$$

No caso de fluidos invíscidos, não há efeitos de fricção e o fluido pode deslizar na interface [27]. Esta é a condição de deslizamento (*slip boundary condition*), isto é, seja S e $\mathbf{u}$ definidos como antes e seja $\mathbf{n}$ um vetor normal a S . Então,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } S. \quad (1.11)$$

A interface entre dois fluidos não é rígida e a determinação de seu movimento faz parte do problema. Como a interface se move junto com os fluidos, as componentes das velocidades perpendiculares à superfície devem ser iguais nos dois fluidos. Assim, sejam $\mathbf{u}_1$ e $\mathbf{u}_2$ as velocidades dos fluidos 1 e 2 na superfície S respectivamente e seja $\mathbf{n}$ normal a S , tem-se então,

$$(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } S, \quad (1.12)$$

e, analogamente à condição de não deslizamento para fluidos invíscidos, não há restrições para as componentes da velocidade tangentes a S . No entanto, ainda há outra condição de contorno que precisa ser satisfeita na interface entre dois fluidos, a qual é conhecida como a lei de Laplace [26, 27] e discutida em seguida.

1.2.4 A Lei de Laplace

Fenomenologicamente, sabemos que sobre as partículas de um líquido atua uma força de coesão. Sua origem pode ser explicada pela existência de forças atrativas entre moléculas. Para uma partícula no interior do fluido, há líquido em todas as direções, resultando em um balanceamento. Entretanto, isto não é verdade na fronteira e a força de coesão resultante aponta na direção onde há líquido. Quando há mais de um fluido, as forças atrativas podem ser compa-

tíveis, os fluidos se misturam e são ditos miscíveis. Quando os dois fluidos não se misturam, estes são chamados de imiscíveis [26, 16].

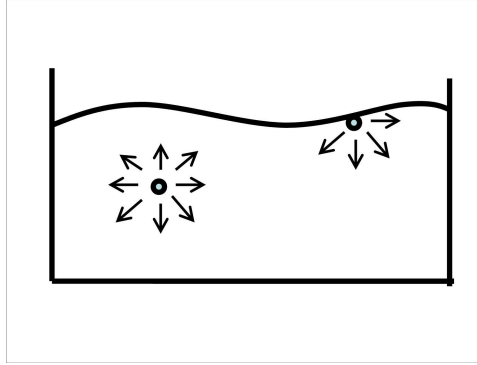


Figura 1.5 Forças de coesão cujo balanceamento depende da posição do elemento de fluido.

As forças de coesão originam a tensão superficial na fronteira de um fluido. No caso de dois fluidos imiscíveis, este fenômeno se expressa através de uma descontinuidade da pressão na interface que obedece a lei de Laplace [27, 26]:

$$p_1 - p_2 = \sigma \kappa, \quad (\text{Lei de Laplace}) \quad (1.13)$$

onde p_1 e p_2 são as pressões do fluido 1 e 2 respectivamente na interface, σ é a tensão superficial e κ é a curvatura média definida por

$$\kappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}, \quad (1.14)$$

onde R_1 e R_2 são os raios de curvatura principal.

1.2.5 A Célula de Hele-Shaw

Uma célula de Hele-Shaw consiste em duas placas paralelas, separadas por uma pequena distância b (*gap*) muito menor que qualquer dimensão do sistema [28]. Uma configuração comum é ter as placas retangulares e o fluido ser injetado por uma extremidade e ser extraído pela outra.

As situações físicas de interesse serão descritas pela equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis (Eqs. (1.1) e (1.2)). Uma aproximação comum é considerar o limite de alta fricção do fluido com as placas e o escoamento como quase-estacionário [27]. Assim, os termos $\partial \mathbf{u} / \partial t$ e $(\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u}$ da Eq. (1.1) são desprezíveis. Como b é pequeno, as variações de velocidade na direção transversal (direção $\hat{\mathbf{z}}$) da célula são muito maiores que nas direções paralelas (direções $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$). A Eq. (1.1) resulta:

$$0 = -\frac{1}{\rho} \nabla p - \nu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial z^2}. \quad (1.15)$$

Com a condição de contorno de não deslizamento nas paredes da placa, obtêm-se um perfil parabólico na ordenada z , conhecida como escoamento de Poiseuille (vide Capítulo 2) [8, 27]. Para se eliminar a direção perpendicular da célula, faz-se uma média nesta direção. Desta maneira, o problema fica reduzido a duas dimensões e descrito pela equação:

$$\mathbf{u} = -\frac{b^2}{12\mu} (\nabla p - \mathbf{F}_{\text{ext}}) \quad (1.16)$$

onde $\mathbf{u}$ é a velocidade média bidimensional paralela as placa, μ é o coeficiente de viscosidade, p é pressão e $\mathbf{F}_{\text{ext}}$ é a força externa. Vale ressaltar que os vetores agora são bidimensionais. A equação acima tem o mesmo formato de uma lei válida para os meios porosos conhecida como lei de Darcy:

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{u} (\nabla p - \mathbf{F}_{\text{ext}}), \quad (1.17)$$

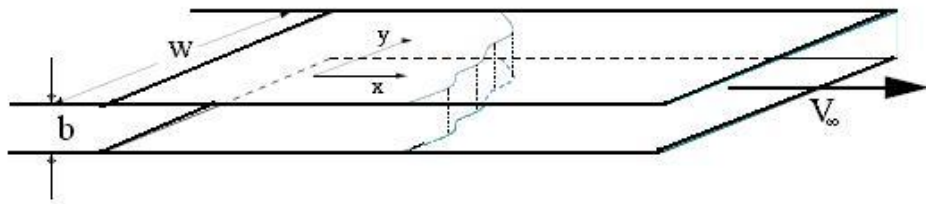


Figura 1.6 Célula de Hele-Shaw[8].

onde k é a permeabilidade do meio.

Pode-se chegar a uma expressão mais compacta para a pressão da Eq. (1.16) se considerarmos apenas forças potenciais:

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = -\nabla U_{\text{ext}}, \quad (1.18)$$

com a condição adicional:

$$\nabla^2 U_{\text{ext}} = 0. \quad (1.19)$$

Agora, usando a Eq. (1.2), obtemos a equação de Laplace para a pressão:

$$\nabla^2 p = 0. \quad (1.20)$$

As condições de contorno na célula de Hele-Shaw são análogas ao caso mais geral já discutido. Assim, se existe um obstáculo como uma conta circular no meio da célula, a velocidade $\mathbf{u}$ na interface será nula. Quando se lida com dois fluidos, a lei de Laplace é aproximadamente válida na sua versão bidimensional:

$$p_1 - p_2 = \sigma \kappa, \quad (1.21)$$

onde p_1 e p_2 são as pressões do fluido 1 e 2 respectivamente, σ é a tensão superficial e κ é a curvatura da linha definida pela interface:

$$\kappa = \frac{1}{R}. \quad (1.22)$$

Uma equação mais precisa leva em conta o efeito da curvatura no plano perpendicular às placas e se encontra em [7]. No entanto, a Eq. (1.21) é uma boa aproximação para a maioria dos casos.

A continuidade da componente normal da velocidade também pode ser expressa em termos

da pressão. De fato, usando a Eq. (1.16) em:

$$(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (1.23)$$

Obtemos

$$\frac{1}{\mu_1}(\partial_n p_1 + \partial_n U_{\text{ext}1}) = \frac{1}{\mu_2}(\partial_n p_2 + \partial_n U_{\text{ext}2}), \quad (1.24)$$

onde ∂_n é a derivada na direção normal à interface e os sub-índices dizem respeito a qual fluido o termo pertence.

Um fenômeno de interesse ocorre quando um fluido menos viscoso invade outro de maior viscosidade. Estudos experimentais mostram que a interface entre os dois fluidos, quando inicialmente reta, é instável e cresce formando padrões parecidos com dedos. Como este crescimento ocorre depende, dentre outros fatores, dos valores das viscosidades e da tensão superficial. Para um grande número de situações, observou-se a formação de um único "dedo" depois de um processo de competição. Este caso foi observado e analisado por Saffman e Taylor [5] e por isso a instabilidade inicial da interface passou a ser conhecida como a instabilidade de Saffman-Taylor, e o único dedo que sobrevive em algumas situações como o dedo de Saffman-Taylor.

1.3 Crescimento de Interfaces

A dinâmica do crescimento de interfaces vem sendo objeto de grande interesse e de inúmeras investigações teóricas e experimentais [4]. O fenômeno ocorre em diversos contextos, como no escoamento em meios desordenados, no crescimento de bactérias e na deposição de átomos para formação de filmes finos [4]. Verificou-se em vários casos que o enrugamento da interface obedece a leis de escala e podem ser agrupados em classes de universalidade. Experimentos recentes verificam este comportamento para o escoamento de dois fluidos imiscíveis em uma

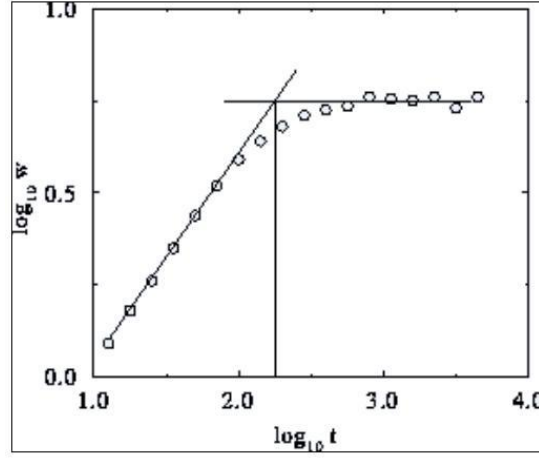


Figura 1.7 Gráfico da rugosidade versus o tempo [4].

célula de Hele-Shaw com desordem [8, 9]. Esta desordem pode ser obtida por diversos meios como, por exemplo, inserir obstáculos fixos ou variar espacialmente o *gap* b .

Uma interface no plano pode ser descrita por uma função de uma variável. Como ilustração, suponha um modelo discreto, cuja dinâmica do enrugamento obedeça as referidas leis de escala e a interface seja caracterizada por

$$h(i, t), \quad (1.25)$$

onde h é a altura da interface no ponto i e tempo t . A descrição quantitativa do crescimento é dada através de duas outras funções: a altura média

$$\bar{h}(t) \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h(i, t), \quad (1.26)$$

onde L é o largura do sistema, e a espessura da interface (o desvio padrão da interface)

$$w(L, t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2}, \quad (1.27)$$

que caracteriza a rugosidade.

Por definição a interface inicialmente é uma reta. Logo $w(L, 0) = 0$. À medida que o tempo

passa, a interface começa a enrugar. Um dos fatos marcantes em diversos sistemas é que a rugosidade satura. Depois de um dado tempo t_x o valor desta flutua em torno de $w_{\text{sat}}(L)$. Estão associados às leis de escala pelo menos três expoentes críticos relevantes: α , ou expoente de enrugamento, β , ou expoente de crescimento e z , chamado de expoente dinâmico. A classe de universalidade é determinada pelos expoentes críticos citados quando estes são os únicos relevantes. Estes são definidos abaixo (veja Fig. 1.7):

No início, quando a interface começa a enrugar, temos para w :

$$w(L, t) \sim t^\beta. \quad (1.28)$$

Este crescimento não permanece indefinidamente. Então há uma transição até se chegar ao valor saturado:

$$w_{\text{sat}}(L) \sim L^\alpha. \quad (1.29)$$

E finalmente se descreve o comportamento de escala do tempo de saturação t_x com uma lei de potência:

$$t_x(L) \sim L^z. \quad (1.30)$$

Os expoentes de escala não são independentes. Uma maneira objetiva de observar o "colapso" de medidas distintas em um sistema caracterizado pelos expoentes mencionados é dado pelos dois passos descritos na Fig. 1.8 [4]. Primeiro, estabelecemos um gráfico de $w(L, t)/w_{\text{sat}}(L)$ e notamos que todos saturam no mesmo valor. A seguir, fazemos o gráfico em função de t/t_x e, se a descrição teórica é consistente, as curvas "colapsam".

Este esquema sugere que $w(L, t)/w_{\text{sat}}(L)$ é função apenas de t/t_x ,

$$\frac{w(L, t)}{w_{\text{sat}}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right). \quad (1.31)$$

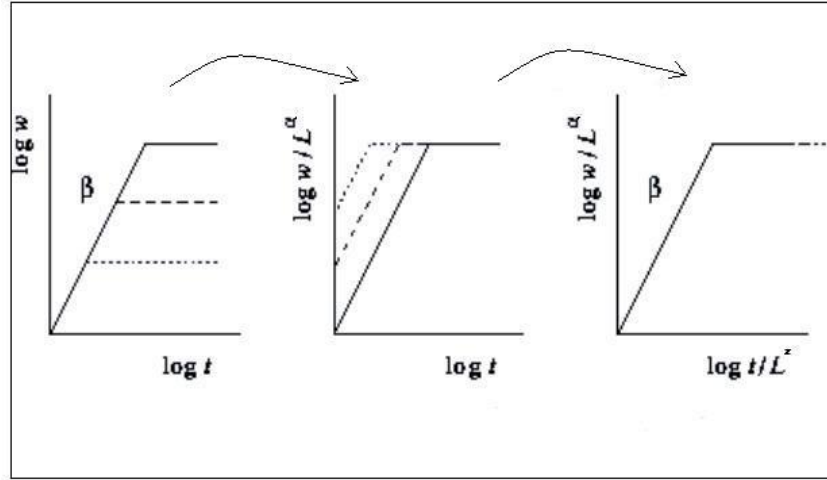


Figura 1.8 Colapso de medidas distintas de um mesmo sistema [4].

Se t_x e $w_{\text{sat}}(L)$ forem substituídos por (1.29) e (1.30) respectivamente, obtém-se a relação de escala de Family-Vicsek [29]:

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (1.32)$$

onde f é a função de escala. Por fim, há uma relação simples para os expoentes para todos os processos de enrugamento que obedecem a Eq. (1.32):

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \sim \frac{L^\alpha}{L^{z\beta}} t^\beta \quad (1.33)$$

logo,

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (1.34)$$

Autômato Celular de Gás na Rede

Neste capítulo, será mostrado como os modelos de ACGR reproduzem o comportamento descrito pela equação de Navier-Stokes [15, 16, 17, 18]. Primeiro apresentaremos, em detalhes, o modelo FHP [14], descrevendo como extrair os resultados através de um *coarse graining*, mostrando uma simulação em seguida. Prosseguiremos examinando alguns dos fundamentos da teoria de gases na rede como um caso particular dos processos de Markov em um espaço de configuração finita [16]. Através de conceitos fundamentais, como a ergodicidade, veremos por que as quantidades invariantes são tão importantes e como elas conduzem a distribuições de equilíbrio. É importante ressaltar que se o modelo conservar mais quantidades do que deve, o comportamento macroscópico será completamente diverso dos fluidos reais. Em seguida, descreveremos como da microdinâmica dos modelos de ACGR podemos chegar às equações hidrodinâmicas através da teoria cinética aplicado a sistemas discretos. Em particular, utiliza-se o formalismo do método de Chapman-Enskog usando as distribuições de equilíbrio obtidas anteriormente. Por fim, discutiremos a simulação do escoamento de Poiseuille obtendo os valores da viscosidade para uma das versões do FHP.

2.1 O Modelo de Frisch-Hasslacher-Pomeau

O modelo de FHP introduzido em 1986 [14] foi o primeiro modelo de ACGR que reproduziu a dinâmica da equação de Navier-Stokes com sucesso. Desde então surgiram pequenas modificações neste modelo sendo classificados por FHP-I, FHP-II e FHP-III. O primeiro deles (o FHP-I) permite até seis partículas por sítio, enquanto os outros dois permitem até sete. A dife-

rença entre os modelos FHP-II e FHP-III reside nas regras de colisões permitidas. Todos esses modelos possuem o mesmo comportamento macroscópico, porém com coeficientes de viscosidade diferentes. A mudança na análise destas variantes do modelo é mínima, sendo necessárias apenas ligeiras modificações ou pequenas generalizações.

A rede dos modelos de FHP é triangular (regular) e, portanto, possui simetria hexagonal. Daqui em diante a palavra nó ou sítio substituirão a expressão vértices da rede. Cada sítio possui seis arcos (*links*) ligados aos seus vizinhos mais próximos. As partículas são indistinguíveis, todas com massa unitária. O vetor da rede $\mathbf{c}_i$

$$\mathbf{c}_i = (\cos i \frac{\pi}{3}, \sin i \frac{\pi}{3}), i = 1, \dots, 6 \quad (2.1)$$

conecta o nó ao seu vizinho mais próximo na direção i . No FHP-I, as velocidades das partículas são iguais a um dos vetores da rede e a sua unidade é "unidade de rede por passo de tempo". Note que o módulo de c_i é unitário. Deste modo, a cada passo de tempo, a partícula "pula" do sítio em que ele estava no tempo t , para um de seus vizinhos no tempo $t + 1$. Todos os sítios possuem seis células, cada qual associada a uma direção de velocidade e seu estado indica se há partículas naquela direção. A célula se encontra vazia ou ocupada por no máximo uma partícula (princípio de exclusão). Deste modo, há no máximo seis partículas por sítio com velocidades diferentes entre si. Nos modelos FHP-II e FHP-III há sete células por sítios, seis com a mesma descrição das do modelo FHP-I, e a sétima associada à existência de partículas paradas.

A cada passo de tempo, além das partículas se moverem para sítios vizinhos, elas podem colidir, desde que se conserve o número de partículas e o momento total de cada sítio. Por exemplo, suponha que em algum sítio existam duas partículas com velocidades na direção horizontal e sentidos opostos. Claramente o momento total é zero. A colisão se dá com a mudança de suas velocidades desde que seu momento total permaneça zero. Assim, uma possível configuração pós-colisão seria uma partícula apontar na diagonal da direita/cima e a outra apontar para a diagonal esquerda/baixo. Veja a Fig. 2.1.

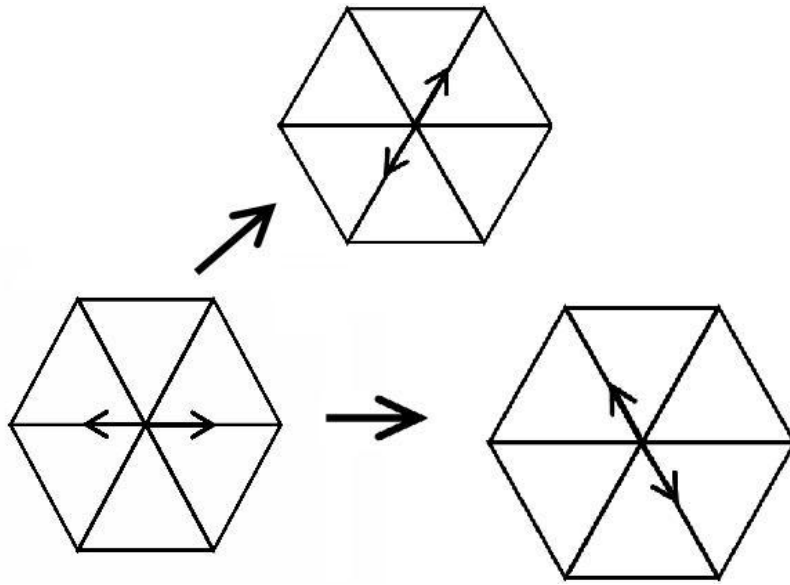


Figura 2.1 Possíveis colisões para duas partículas com momento total nulo.

Na Fig. 2.3 estão listadas as configurações por classes caracterizada por três números: n (o número de partículas), g_x (o dobro do momento na direção horizontal) e g_y (o momento na direção vertical vezes $2/\sqrt{3}$). Estes fatores multiplicativos servem para fazer com que g_x e g_y sejam inteiros. Classes com mais de um elemento podem ser escolhidas como regra de colisão, ou seja, se a configuração em um dado sítio pertence à uma dessas classes, esta pode ser transformada em outra da mesma classe no momento da colisão. A viscosidade no modelo é determinada, dentre outros fatores, pelas regras permitidas no modelo como será visto mais adiante. No momento de escolher quais regras utilizar, é necessário tomar cuidado com conservação de quantidades indesejáveis. Por exemplo, no modelo em que só há colisão entre duas partículas com velocidades na mesma direção e sentidos opostos, além do número de partículas e do momento total, é conservado também quatro quantidades espúrias (a diferença do número de partículas que correm em sentido oposto em toda a rede [16]). Uma maneira de circundar este problema é permitir que mais tipos de regras possam ocorrer como, por exemplo, a colisão entre três partículas. De fato, na Ref. [14] foi permitido apenas as regras com duas ou três partículas.

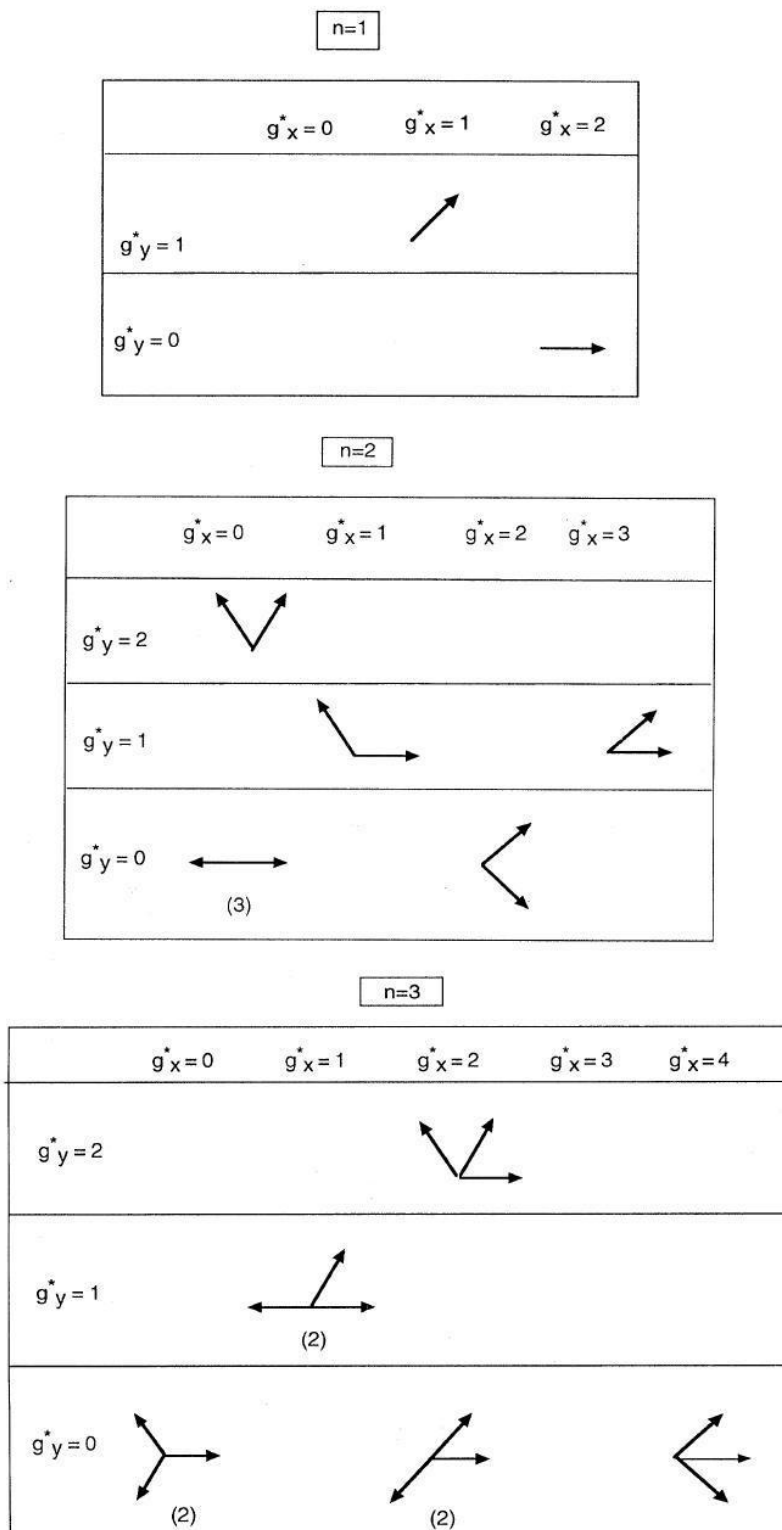


Figura 2.2 Configurações para o modelo de seis partículas. Cada entrada corresponde a uma mesma classe (n, g_x, g_y) . O número de elementos em uma mesma classe está entre parênteses. Configurações para outros valores de (g_x, g_y) podem ser obtido por reflexão. Configuração para $n > 3$ são obtidos trocando partículas com buracos. [30].

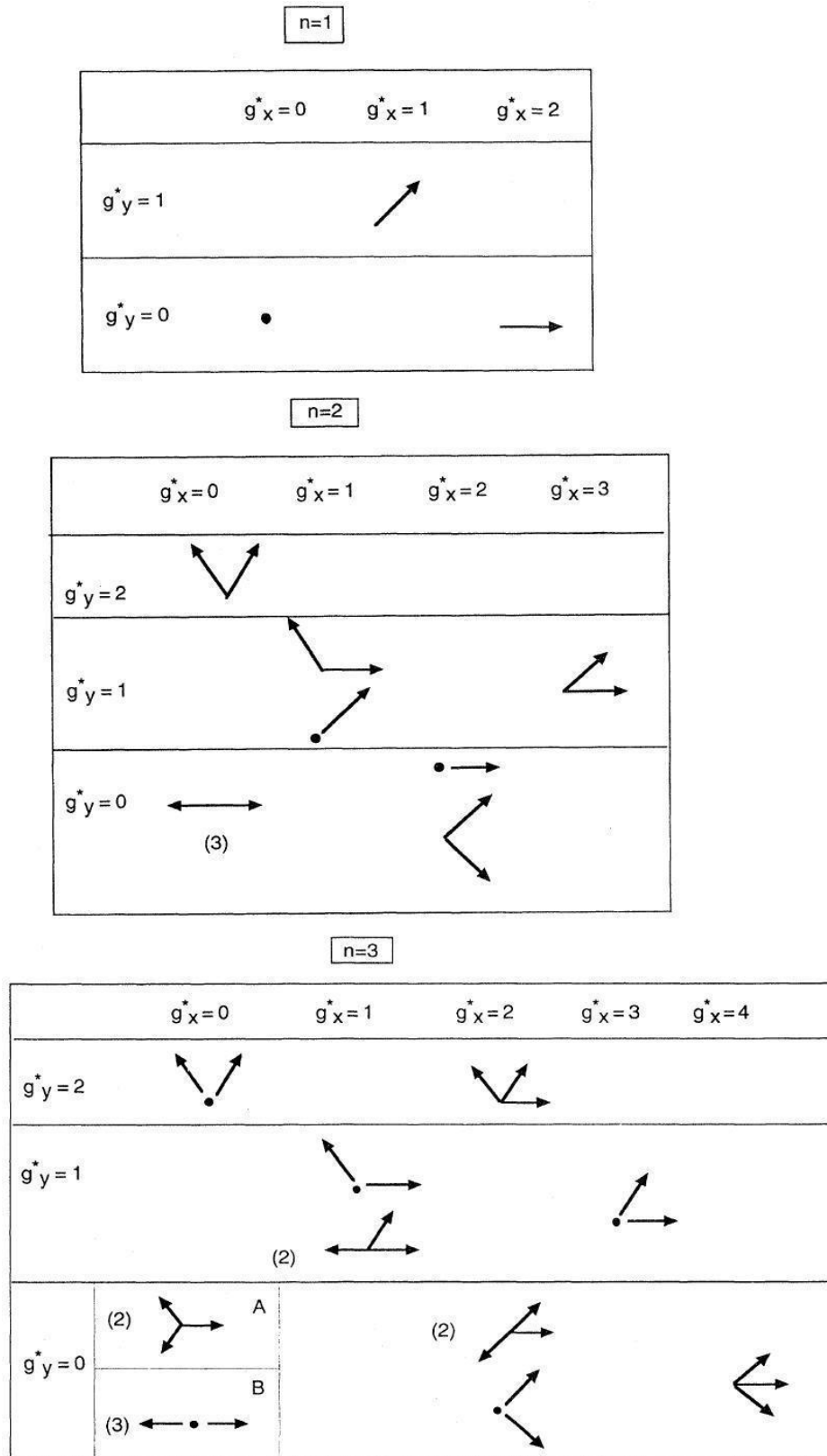


Figura 2.3 Figura similar a anterior, porém para o modelo de sete partículas. Círculos sólidos representam partículas paradas [30].

As regras podem ser determinísticas ou não. Se forem determinísticas, dada uma configuração inicial do nó que permita mais de uma configuração pós-colisão, só será escolhida apenas uma delas. No caso não-determinístico, haverá uma escolha aleatória. No caso da colisão de duas partículas com velocidades opostas, há sempre duas escolhas possíveis (veja Fig. 2.1). Neste caso, se a escolha não for aleatória podemos ter um modelo quiral, pois esta colisão corresponde a uma rotação das velocidades individuais que pode ser realizada sempre em um mesmo sentido se não tomado o devido cuidado. Sem este cuidado, resulta que a dinâmica não é invariante por reflexão espacial, característica que será herdada pelo comportamento macrodinâmico. No entanto, os fluidos reais não exibem essa quebra de simetria. Uma maneira de solucionar este problema é usar uma regra aleatória com iguais probabilidades para cada sentido e obter novamente a simetria perdida.

Em termos mais formais, o sítio se localiza em $\mathbf{x}$ cada qual com seu estado determinado por seis ou sete variáveis booleanas $n_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, \dots, 6$ para FHP-I e $i = 0, \dots, 6$ para FHP-II e FHP-III), onde $n_i = 1$ significa que há uma partícula na célula i e $n_i = 0$ significa ausência de partículas. A dinâmica se realiza em dois sub-passos: a propagação e a colisão. A propagação se define pela expressão: $n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t)$. Ou seja, a partícula que estava em $\mathbf{x}$ no tempo t estará em $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$ no tempo $t + 1$, com a mesma velocidade c_i . Se definirmos $\mathbf{c}_0 \equiv (0, 0)$ e usando a variável n_0 associada as partículas paradas, a expressão acima continua sendo utilizada para este caso: $n_0(\mathbf{x} + \mathbf{c}_0, t + 1) = n_0(\mathbf{x}, t)$. A colisão se realiza trocando os estados da célula em um mesmo sítio.

Com o autômato definido, resta saber como obtemos as quantidades hidrodinâmicas do modelo. Estas são obtidas através de um *coarse graining*. Assim, seja $N_i(\mathbf{x}, t) = \langle n_i(\mathbf{x}, t) \rangle$, uma média espaço-temporal de n_i . A interpretação de N_i segue a dada pela teoria cinética, a saber, o número médio de partículas encontradas na direção i , na posição $\mathbf{x}$, no tempo t . Com isto em mão, define-se a densidade ρ :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^6 N_i(\mathbf{x}, t), \quad (\text{modelo FHP-I}) \quad (2.2)$$

ou

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^6 N_i(\mathbf{x}, t) + N_0 \quad (\text{modelo FHP-II e III}), \quad (2.3)$$

e o momento $\mathbf{j}$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^6 \mathbf{c}_i N_i(\mathbf{x}, t) \quad (\text{todos os modelos}). \quad (2.4)$$

Por fim, a velocidade $\mathbf{u}$ é definida da maneira usual, segundo a relação:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (2.5)$$

As médias N_i não precisam ser espaço-temporais. Podemos ter a média de um ensemble de simulações ou fazer somente uma média espacial. Note que estas são quantidades por sítio, não por área. A densidade de partículas é o número médio de partículas no sítio $\mathbf{x}$. A densidade de momento $\mathbf{j}$ é o momento médio no sítio $\mathbf{x}$. A unidade do momento é massa vezes unidade de rede por passo de tempo:

$$\mathbf{j} = \frac{[\text{massa}][\text{unidade de rede}]}{[\text{passo de tempo}]}. \quad (2.6)$$

Na realidade, será visto nas próximas seções que estas definições de velocidade e densidade conduzem às seguintes equações macroscópicas:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + g(\rho) \cdot (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.8)$$

onde p é a pressão, $g(\rho)$ é uma função que só depende de ρ , ν é a viscosidade cinemática e $\mathbf{F}$ é a força. Apesar de não termos explicitado, a viscosidade é função da densidade.

Note que a Eq. (2.7) é muito parecida com a de Navier-Stokes. A única diferença é a introdução da função $g(\rho)$, que multiplica o segundo termo do lado esquerdo. Para FHP-I a função $g(\rho)$ é:

$$g(\rho) = \frac{3 - \rho}{6 - \rho}, \quad (2.9)$$

enquanto que para o FHP-II e FHP-III é

$$g(\rho) = \frac{147 - 2\rho}{247 - \rho}. \quad (2.10)$$

Existem modelos (diferentes do FHP) que permitem mais de uma partícula estacionária por sítio. Esta mudança afeta o formato de $g(\rho)$. É possível mostrar que quanto mais partículas estacionárias permitidas por sítio, mais a função $g(\rho)$ se aproxima de 1 [16].

Este termo é o que expressa o problema da quebra da invariância de Galileu dos modelos de ACGR. Não há valores de ρ que façam com que $g(\rho)$ seja igual a 1 nos modelos que estamos considerando. Todavia, há várias maneiras de resolvermos este problema e obtermos a equação de Navier-Stokes. Numa primeira abordagem, pode-se absorver $g(\rho)$ nos termos de pressão e força e redefinir a velocidade para:

$$\mathbf{v} = g(\rho)\mathbf{u},$$

obtendo-se, finalmente, a equação:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{F}}, \quad (2.11)$$

Outra maneira é considerar escoamentos estacionários, ou seja, fazer $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = 0$. Neste caso, absorve-se $g(\rho)$ nos termos restantes, redefinindo a viscosidade ν por $\tilde{\nu} = \frac{\nu}{g(\rho)}$. Note que $g(\rho)$

deverá ser maior que zero, caso contrário a viscosidade será negativa. A equação restante fica:

$$(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla\tilde{p} + \tilde{\nu}\nabla^2\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{F}}. \quad (2.12)$$

Em alguns casos desejamos simular o escoamento de Stokes. Neste caso, basta fazer $g(\rho)$ igual a zero ($\rho = 3$ para FHP-I e $\rho = 3.5$ para FHP-II e III). Assim, temos

$$0 = -\nabla P + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{F}. \quad (2.13)$$

2.1.1 Forças e Condições de Contorno

A introdução de forças se dá de maneira razoavelmente intuitiva. Modifica-se a configuração de alguns nós da rede (geralmente escolhido ao acaso) a cada passo de tempo de maneira a mudar o momento total. Obviamente, deve-se fazer de acordo com a intensidade e direção da força. Por exemplo, uma força horizontal da esquerda para a direita é implementada fazendo com que algumas partículas escolhidas aleatoriamente com velocidades apontando para a esquerda passem a apontar para a direita, conservando-se a componente vertical. Veja a Fig. 2.4. Para forças com direções diferentes daquelas obtidas com a mudança de somente uma partícula, pode-se recorrer a um método estatístico. Ao longo de uma região espacial, ou no decorrer do tempo, faz-se com que a mudança do momento total ocorra aproximadamente na direção desejada.

Há duas condições de contorno de interesse na interface com um obstáculo. A condição de não-deslizamento (*no-slip boundary condition*) acontece quando a velocidade é nula na interface entre o fluido e o obstáculo. Esta é implementada fazendo com que a partícula que for para um sítio marcado como um obstáculo seja devolvida (*bounced back*) ao sítio original com a velocidade no sentido inverso ($c_i \rightarrow -c_i$). Segue que a velocidade hidrodinâmica (definida pela Eq. (2.5)) será aproximadamente nula naquela região. Na condição de contorno de desli-

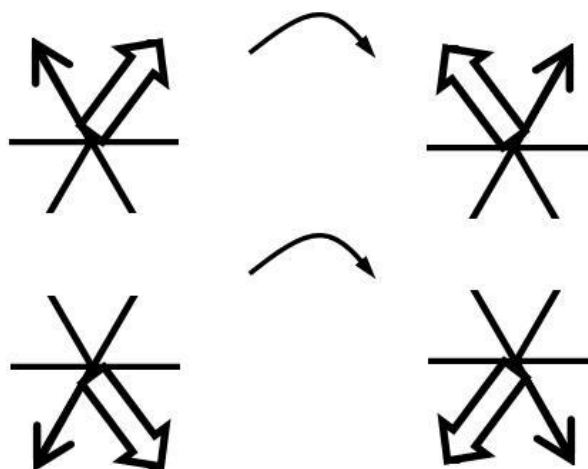


Figura 2.4 Exemplo da atuação de uma força horizontal. A seta normal indica existência de partículas e a seta larga indica vacância. As demais posições podem ou não ter partículas.

zamento (*slip boundary condition*) a componente da velocidade perpendicular ao obstáculo é nula, mas a tangencial não. Assim, quando uma partícula chega a um sítio marcado como este tipo de obstáculo, ela é refletida: sua velocidade perpendicular é invertida, a tangencial permanece a mesma, veja a Fig. 2.6. Devemos observar que para o autômato tanto faz lidarmos com poucos obstáculos, ou com vários obstáculos com uma geometria complexa. O tempo computacional é praticamente o mesmo. Isto é que torna o seu uso tão adequado para condições de contorno complexa.

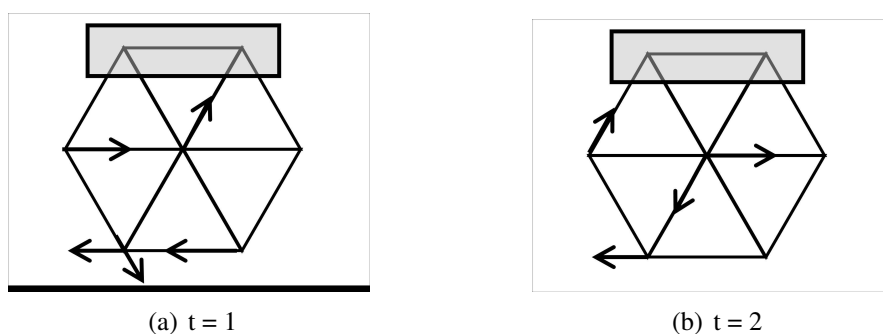


Figura 2.5 Obstáculo com condição de contorno de não deslizamento. Note a partícula do sítio do meio voltando para o mesmo lugar, no entanto com o momento invertido.

A condição de "túnel de vento" (*wind-tunnel*) é implementada fazendo surgir partículas nos

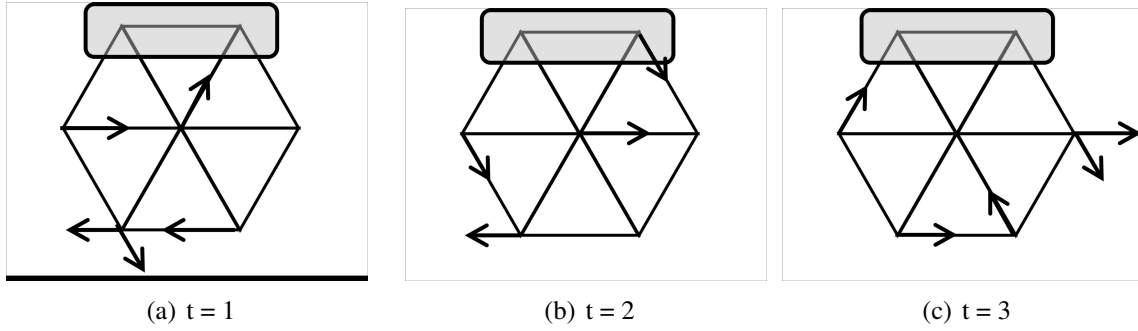


Figura 2.6 *Obstáculo com condição de contorno de deslizamento. A partícula do sítio do meio precisa de dois passos para ser refletida.*

lados da rede de acordo com a distribuição no equilíbrio que ainda será definida. Nas próximas seções será mostrado que a distribuição de N_i no equilíbrio é dada por uma função da velocidade e da densidade (Eqs. (2.87) e (2.88)).

A condição de contorno periódica é implementada conectando os sítios de uma extremidade a extremidade oposta de maneira adequada. Para aplicar esta condição na direção vertical é necessário que tenhamos um número par de linhas. Caso contrário, não será possível conectar os sítios de baixo de maneira adequada aos de cima.

Até aqui descrevemos tudo o que é necessário saber para implementar e obter resultados com o modelo de FHP para Autômatos Celulares de Gás na Rede. A partir de agora, até o fim desta seção, iremos tratar das limitações, efeitos indesejados (e como evitá-los) e, por fim, um exemplo.

2.1.2 Limitações, Problemas e Soluções

Como todo modelo, há limitações. Não há garantias de que a densidade não irá variar espacialmente. Na realidade, pequenas variações são necessárias para que haja diferença de pressão, porém a magnitude da variação deve ser pequena o suficiente para considerarmos o escoamento como incompressível [16, 17]. Por isso, é necessário monitorar para que esta variação não ocorra bruscamente. O módulo da velocidade também deve ser pequeno quando com-

parada com a velocidade do som do modelo considerado (limite de baixo número de Mach). Além disso, a variação de velocidade deve ser suave. A velocidade máxima é 1 unidade de rede por passo de tempo; a velocidade do som depende da densidade, mas seus valores típicos estão entre 0,5 e 0,8 unidades de rede por passo de tempo [16, 15]. Na prática, velocidades médias abaixo de 0,3 podem ser consideradas suficientemente pequenas. As viscosidades cinemáticas de FHP-I, FHP-II e FHP-III estão dentro do intervalo de 0,008 a 5. Apesar destas limitações, em algumas situações é possível chegar a um número de Reynolds alto o suficiente para que haja turbulência.

É necessário levar em conta a questão das invariantes espúrias. A inclusão da colisão com 3 partículas destrói a invariante conservada pela colisão com duas partículas. Contudo, podem existir mais invariantes. Infelizmente não há nenhum método sistemático para detectar todas as possíveis invariantes no ACGR. De fato, Zanetti [31] encontrou invariantes lineares espúrias para todos os modelos ditos FHP. Estas quantidades foram denominadas de invariantes "staggered" de Zanetti e são ao todo 3. Este problema pode ser circundado se ao inicializarmos o autômato estas invariantes forem pequenas, pois neste caso a sua influência na dinâmica é mínima e seus efeitos podem ser desprezados. As 3 quantidades são:

$$H_i = (-1)^t \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} (-1)^{\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{x}} \mathbf{c}_i^\perp \cdot \mathbf{j}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.14)$$

onde Ω é o conjunto de todos os nós da rede, $\mathbf{c}_i$ está definida acima, $\mathbf{c}_i^\perp$ é obtido rotacionando $\mathbf{c}_i$ por $\pi/2$ no sentido anti-horário, $\mathbf{b}_i = (2/\sqrt{3})\mathbf{c}_i^\perp$ é o vetor recíproco da rede perpendicular $\mathbf{c}_i$ e $\mathbf{j} = \sum_k \mathbf{c}_k n_k(\mathbf{x}, t)$ é o momento local. Note que há uma dependência com o tempo. Estritamente falando, estas quantidades serão invariantes se as dimensões forem de número par na direção $\mathbf{c}_i^\perp$. Porém, como será visto adiante, o principal efeito na dinâmica destas quantidades indesejadas é introduzir novas densidades locais, o que ocorre independente do tamanho da rede. Apesar de não termos certeza de que não existem outras quantidades conservadas, os resultados das simulações atestam a eficácia dos modelos, de maneira que se estas invariantes existem só

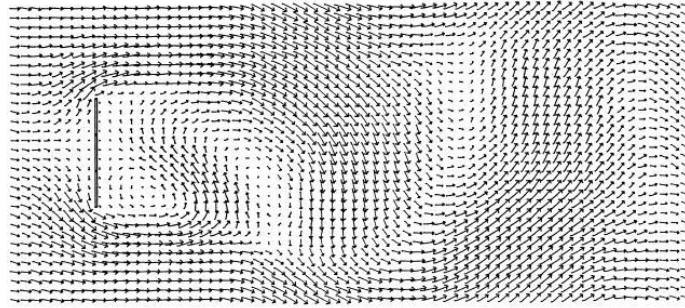


Figura 2.7 Simulação através de ACGR de uma situação em que aparecem as ruas de vórtices de von Karman [21].

se fazem presentes em casos patológicos e têm efeito desprezível nas simulações em geral.

2.1.3 Um Exemplo

Finalmente um exemplo ilustrativo [21]: o escoamento bidimensional com um obstáculo plano. O que está ilustrado nas Fig. 2.7 foi obtido usando o modelo FHP-III e uma rede com 2816 X 1024 sítios, condições periódicas na direção vertical condição de "túnel de vento" na horizontal; densidade e velocidade uniforme iniciais: $\rho = 2,1$ e $\mathbf{u} = 0,428$). O número efetivo de Reynolds é aproximadamente 300 e o número de Mach é 0,654. Há um obstáculo retangular fixo, fino na horizontal e com comprimento de 216.5 na vertical onde a condição de contorno de não deslizamento é utilizada. No início, formam-se zonas de circulação perto do obstáculo como mostrado na Fig 2.7. Para um tempo suficiente longo, a simetria do escoamento é quebrada e obtêm-se a formação de ruas de vórtices de Von Karman (*Von Karman streets*).

Em resumo, nesta Seção descrevemos o que é o modelo FHP, como implementar a aplicação de forças e as condições de contorno e como obter os resultados de maneira correta. Em seguida foram apresentados os cuidados a serem tomados: a velocidade média deve ser pequena (geralmente abaixo de 0,3) e sua variação não pode ser brusca; deve-se observar para que a densidade varie muito pouco para termos um escoamento incompressível; se houver condições de contorno periódicas na vertical, o número de linhas deve ser par; As invariantes 'staggered'

de Zanetti devem ser inicializadas próximo à zero para que a Eq. (2.7) permaneça válida.

2.2 Mecânica Estatística: Processos de Markov

Nesta seção determinaremos a distribuição de equilíbrio para o ACGR. Será explicada a necessidade de que não existam quantidades espúrias no modelo ou que, pelo menos, suas influências sejam desprezíveis. O desenvolvimento segue em analogia com a obtenção da distribuição de Boltzmann na mecânica estatística, ou seja, de que esta é a distribuição mais provável dada às restrições impostas ao sistema como a velocidade média e o número de partículas.

2.2.1 Autômatos Celulares

Os Autômatos Celulares são sistemas dinâmicos com um conjunto de configurações finitas X que evolui de maneira determinística de uma configuração s para outra [16]. A configuração s fica completamente definida no tempo t quando a configuração de cada célula $s_i(\mathbf{x}, t)$ pertencente ao autômato é determinada. A dinâmica é estabelecida através de uma função F da configuração local $s(\mathbf{x}, t)$ e dos seus vizinhos V_x :

$$s(\mathbf{x}, t + 1) = F[s(\mathbf{x}, t), s(\mathbf{y}_1, t), \dots, s(\mathbf{y}_n, t)]_{y_1, \dots, y_n \in V_x}. \quad (2.15)$$

Utilizaremos a seguinte notação: $s(t)$ é a configuração global, $s(\mathbf{x}, t)$ é a configuração do sítio $\mathbf{x}$ e $s_i(\mathbf{x}, t)$ é a configuração da célula i do sítio $\mathbf{x}$, todas no tempo t . Além disto, F é uma função de aplicação local como na Eq. (2.15). É conveniente definir $\mathbf{F}$, em negrito, como uma função de aplicação global, ou seja:

$$s(t + 1) = \mathbf{F}[s(t)]. \quad (2.16)$$

Na maioria dos modelos de ACGR os sítios são definidos como nós de uma rede de Bravais L. Uma rede de Bravais D-dimensional é um conjunto de pontos definidos por um conjunto de D vetores geradores independentes $\mathbf{u}_k$. Qualquer ponto $\mathbf{x}$ da rede pode ser escrita na forma de uma combinação linear dos vetores geradores com coeficientes inteiros:

$$\mathbf{x} = n_1 \mathbf{u}_1 + \dots + n_D \mathbf{u}_D,$$

onde todos os n_i são variáveis inteiras. Exemplos de redes de Bravais são a rede triangular dos modelos FHP e a rede quadrada do modelo HPP (veja a primeira Seção do Capítulo 1). Um ponto na rede está conectados aos seus vizinhos através dos vetores $\mathbf{c}_i$. Isto significa que a magnitude deste vetor é de uma unidade de rede. Vamos chamar estes de vetores de velocidade.

A função F é mais bem representada como composição de duas funções: C para colisão e S para a propagação (S de *streaming*). C é função de apenas um nó e depende do modelo em questão:

$$s'(\mathbf{x}, t) = C[s(\mathbf{x}, t)]. \quad (2.17)$$

e S é função do nó $\mathbf{x}$ e de seus vizinhos $V_x (\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, i = 1 \dots 6)$, e é tal que

$$s(\mathbf{x}, t + 1) = S[s(\mathbf{x}, t), s(\mathbf{y}_1, t), \dots, s(\mathbf{y}_n, t)]_{y_1, \dots, y_n \in V_x}$$

. Deste modo, S fica completamente determinada. Finalmente, podemos definir como se dá a evolução da célula:

$$s_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = s'_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.18)$$

ou seja,

$$s(\mathbf{x}, t + 1) = S[s'(\mathbf{x}, t), s'(\mathbf{y}_1, t), \dots, s'(\mathbf{y}_n, t)]_{y_1, \dots, y_n \in V_x}, \quad (2.19)$$

onde s' aqui significa o resultado de $C[s]$ ($s' = C[s]$), como na Eq. (2.17). De maneira análoga, globalmente teremos $\mathbf{F}$ como composição de $\mathbf{S}$ e $\mathbf{C}$. Assim, a evolução global é escrita como:

$$s(t+1) = \mathbf{S} \circ \mathbf{C}[s(t)]. \quad (2.20)$$

2.2.2 Processos de Markov

O operador de colisão geralmente é não-determinístico. Dada a configuração local antes da colisão $\mathbf{n} = s(\mathbf{x})$, o operador escolhe a configuração de pós-colisão $\mathbf{n}'$ de maneira aleatória com uma taxa de transição local (ou probabilidade) $A(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$. Se nunca ocorre uma determinada transição, seu valor é zero (por exemplo, quando a configuração pós-colisão não possui o momento igual ao de pré-colisão). Assim, A define o operador de colisão e é um dos parâmetros ajustáveis do modelo. É possível mudar as características ou os coeficientes associados ao modelo modificando a definição de A . Porém, existem restrições. As taxas de transição devem ser limitadas [15, 17, 16]:

$$0 \leq A(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \leq 1. \quad (2.21)$$

e a soma para todos os $\mathbf{n}'$ normalizada a um (soma de todos os eventos possíveis):

$$\sum_{\mathbf{n}'} A(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = 1. \quad (2.22)$$

Um modelo será dito estatisticamente reversível se

$$A(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = A(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \quad \text{para todo } \mathbf{n}, \mathbf{n}'. \quad (2.23)$$

No entanto, esta pode ser uma restrição muito forte para alguns modelos, de maneira que pode ser relaxado para uma condição mais fraca, a saber, o equilíbrio semi-detalhado (*semi-detailed*

balance):

$$\sum_{\mathbf{n}} A(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = 1 \quad \text{para todo } \mathbf{n}'. \quad (2.24)$$

Será necessária nos desenvolvimentos da próxima seção que A preserve a simetria da rede. Mais precisamente, seja uma transformação $\mathbf{R}$, aplicada a um ponto qualquer da rede que a deixe inalterada (por exemplo, uma rotação de $\pi/2$ radianos em uma rede quadrada). A taxa de transição deve obedecer:

$$A(\mathbf{R}\mathbf{n}, \mathbf{R}\mathbf{n}') = A(\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \quad (2.25)$$

Um processo de Markov é definido por um conjunto finito de taxas de transição $a(s \rightarrow s')$ que determina a probabilidade da configuração s ser transformado em s' [16]. O espaço de configurações X deste tipo de processo também é um conjunto finito. As taxas de transição devem satisfazer:

$$a(s \rightarrow s') \geq 0 \quad \text{e} \quad \sum_{s'} a(s \rightarrow s') = 1. \quad (2.26)$$

Os modelos de ACGR não-determinísticos são processos de Markov cuja taxa de transição $a(s \rightarrow s')$ é a probabilidade de s ser transformado em s' através de uma colisão e uma propagação. Como a propagação é um passo determinístico, teremos que:

$$a(s \rightarrow s') = a_c(s \rightarrow S^{-1}s'),$$

onde $a_c(r \rightarrow r')$ é a probabilidade de r ser transformado em r' através de uma colisão. De outro modo:

$$a_c(s \rightarrow s') = \prod_{\mathbf{x} \in L} A(s(\mathbf{x}), s'(\mathbf{x})), \quad (2.27)$$

a qual está associada a um processo de Markov com probabilidade $P_t(s)$ de observar a configu-

ração s num tempo t . A evolução desta quantidade nestes processos é denominada de equação de Chapman-Kolmogorov [15, 17]. No entanto, é comum usar na literatura do ACGR a expressão equação de Liouville por causa da analogia com a mecânica estatística clássica;

$$P_{t+1}(s) = \sum_{s' \in X} a(s' \rightarrow s) P_t(s'). \quad (2.28)$$

A solução detalhada desta equação é analiticamente intratável em diversas situações de interesse. Felizmente, só estamos interessados nas soluções estacionárias que definem o equilíbrio estatístico do processo de Markov. As quantidades conservadas estão intimamente ligadas a este equilíbrio [16] e as distribuições deste equilíbrio serão utilizadas para se obter as equações macrodinâmicas mais adiante.

2.2.3 Componentes Ergódicos

Antes da derivação das distribuições mencionadas é conveniente fazermos uma digressão sobre algumas propriedades das "trajetórias" das probabilidades. Diz-se que a configuração b é conectada a c , e se escreve $b \rightarrow c$, se existe uma cadeia $s^1, \dots, s^k$ de configuração tais que $a(b \rightarrow s^1) > 0$, $a(s^1 \rightarrow s^2) > 0, \dots, a(s^{k-1} \rightarrow s^k) > 0$ e $a(s^k \rightarrow c) > 0$; b é dito transiente se existe uma configuração c tal que $b \rightarrow c$, mas não $c \rightarrow b$. Configurações não-transientes conectadas definem uma componente ergódica [16]. Em um processo de Markov podem existir mais de um componente ergódico e duas configurações não-transientes pertencem ao mesmo componente se, e somente se, estas estão conectadas [16].

Podemos pensar em $P_t(\cdot)$ como escoando através das configurações, em analogia com fluidos. É intuitivo imaginar que, com a passagem do tempo, esta quantidade flui de configurações transientes para configurações não-transientes. Com a passagem do tempo, a solução da equação de Liouville fica restrita a componentes ergódicas e pode-se mostrar que estas soluções ou são estacionárias, ou são periódicas. Um importante teorema afirma [16]:

Teorema 2.1. *Para um único componente ergódico, existe somente uma solução independente do tempo para a equação de Liouville.*

No caso em que há mais de uma componente, podemos ver cada uma como um processo de Markov isolado, porém com quantidades diferentes de probabilidades.

As taxas globais de transição "herdam" o equilíbrio semi-detalhado (*semi-detailed balance*) das taxas locais. Quando temos esta condição satisfeita, não existem componentes transientes. O próximo teorema justifica termos restringido nosso autômato com esta condição [16]:

Teorema 2.2. *Se existe apenas uma componente ergódica, então a restrição de equilíbrio semi-detalhado (*semi-detailed balance*) é satisfeita e todas as taxas de transição são positivas. Neste caso, a única solução de longo prazo é uma probabilidade constante sobre cada componente ergódica.*

Não é de interesse prová-lo aqui, porém é digno de nota dizer que um passo importante na sua demonstração envolve uma versão do Teorema H [16].

Componentes ergódicas e quantidades invariantes têm uma relação muito estreita. Podemos definir uma invariante no processo de Markov como função ϕ de $s \in X$ que permanece constante no tempo:

$$\phi(s) = \phi(s') \quad \text{se} \quad a(s \rightarrow s') > 0. \quad (2.29)$$

Se não existirem configurações transientes, as invariantes definem uma componente ergódica. Neste caso, se soubermos todas as invariantes, saberemos todas as componentes ergódicas. Mais precisamente, Seja $Z \in X$ componente ergódica de X , então a função definida como $\phi(s) = 1$ se $s \in Z$ e $\phi(s) = 0$ se $s \notin Z$ é uma função característica de Z [16].

Massa e momento são as únicas invariantes intencionais dos modelos de ACGR. Defini-se $\Sigma_{M,G} \subset X$ como o subconjunto de todas as configurações globais que tenham massa total M e momento total G . Podemos chamar estes subconjuntos de níveis de energia em analogia com a nomenclatura empregada na Mecânica Estatística. Não há garantias que um dado modelo

de ACGR não admita outros invariantes; neste caso, o subconjunto $\Sigma_{M,G}$ engloba mais de uma componente ergódica. No entanto, nos desenvolvimentos subsequentes, admite-se que os níveis de energia $\Sigma_{M,G}$ são componentes ergódicas. Esta conjectura leva o nome de "Hipótese Ergódica para Autômatos Celulares de Gás na Rede" [16, 17, 15].

Infelizmente, não é difícil encontrar situações nos modelos introduzidos até hoje que violam esta conjectura. Costumam ser exemplos simples e espera-se que situações mais complexas excluam esta possibilidade. O que pode ser dito hoje é que se considerarmos esta conjectura como verdadeira, os resultados teóricos obtidos através dos métodos da mecânica estatística correspondem aos resultados numéricos dentro da precisão computacional [16, 17].

De fato, o modelo FHP possui as invariantes "staggered" de Zanetti [31]. Foram realizadas buscas por outras quantidades espúrias conservadas, felizmente sem sucesso. Porém não há provas de que não existam. Para o FHP, (e para o FCHC [16], um modelo tridimensional) a conjectura acima deve ser modificada como na hipótese abaixo:

Hipótese 1. *As únicas quantidades conservadas relevantes para os modelos FHP e FCHC são massa, momento e as invariantes "staggereds" de Zanetti.*

Mesmo assim, admitiremos que os efeitos das quantidades "staggered" podem ser desprezados, assumindo como verdadeira a hipótese ergódica original. Na Ref. [16] mostra-se que, se tomadas as precauções devidas, a influência dessas conservações espúrias são realmente desprezíveis.

2.2.4 Distribuição de Fermi-Dirac

Os desenvolvimentos a partir de agora são similares aos da mecânica estatística. As distribuições de probabilidade das soluções estacionárias da equação de Liouville (2.28) são associadas aos ensembles. Os estados com um nível de energia bem definido $\Sigma_{M,G}$ são associados ao ensemble microcanônico. Assim, seja $|\Sigma_{M,G}|$ o número de elementos de $\Sigma_{M,G}$, então

$P(s) = 1/|\Sigma_{M,\mathbf{G}}|$ para $s \in \Sigma_{M,\mathbf{G}}$ e $P(s) = 0$ caso contrário. Da hipótese ergódica original, $P(s)$ estacionário é função da massa e do momento de s :

$$P(s) = f_P(M_s, \mathbf{G}_s). \quad (2.30)$$

Uma solução de grande interesse é aquela correspondente ao limite de um grande ensemble microcanônico Σ , pois uma boa aproximação para um subconjunto S de Σ é o ensemble canônico (ou a distribuição de Gibbs). Através dos métodos usuais, e utilizando conceitos similares, podemos chegar à probabilidade $P_S(s)$ para $s \in S$ [16, 32]:

$$P_S(s) = \frac{1}{Z} \exp(-hM_s - \mathbf{q} \cdot \mathbf{G}_s), \quad (2.31)$$

onde

$$Z = \sum_{s \in X_S} \exp(-hM_s - \mathbf{q} \cdot \mathbf{G}_s), \quad (2.32)$$

$h, \mathbf{q}$ são parâmetros ajustáveis e X_S é o subconjunto do espaço de configurações X referente à S . Uma propriedade digna de nota desta distribuição é a de ser fatorável. Assim, sejam duas sub-redes com configurações s_A e s_B , e seja s a configuração conjunta. Então, se temos uma distribuição de Gibbs [32]:

$$P(s_A, s_B) = P_A(s_A)P_B(s_B). \quad (2.33)$$

Podemos ir mais além e dizer que esta propriedade vale para os subconjuntos com apenas um sítio. É fácil ver isto notando que as M_s e $\mathbf{G}_s$ são quantidades aditivas e usar (2.31):

$$M_s = \sum_{\mathbf{x} \in L} m_s(\mathbf{x}), \quad (2.34)$$

$$\mathbf{G}_s = \sum_{\mathbf{x} \in L} \mathbf{g}_s(\mathbf{x}), \quad (2.35)$$

$$P(s) = \frac{1}{Z} \exp \left[- \sum_{\mathbf{x} \in L} (hm_s(\mathbf{x}) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{g}_s(\mathbf{x})) \right], \quad (2.36)$$

onde $m_s(\mathbf{x})$ é a massa no sítio $\mathbf{x}$, ou o número de partículas, definido por $m_s(\mathbf{x}) = \sum_i s_i(\mathbf{x})$ e $\mathbf{g}_s$ é definido de maneira similar. De outra forma:

$$P(s) = \prod_{\mathbf{x} \in L} P_{\text{loc}}[s(\mathbf{x})], \quad (2.37)$$

onde

$$P_{\text{loc}}(\mathbf{n}) = \frac{1}{Z_{\text{loc}}} \exp(-hm_{\mathbf{n}} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{g}_{\mathbf{n}}), \quad (2.38)$$

e

$$Z_{\text{loc}} = \sum_{\mathbf{m}} \exp(-hm_{\mathbf{n}} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{g}_{\mathbf{n}}), \quad (2.39)$$

com soma sobre todas as configurações locais. Podemos fatorar $P_{\text{loc}}(\mathbf{n})$ ainda mais:

$$P_{\text{loc}}(\mathbf{n}) = \prod_i f_{FD,i}(n_i), \quad (2.40)$$

onde $f_{FD,i}(n_i)$ é a distribuição de Fermi-Dirac:

$$f_{FD,i}(n_i) = \frac{\exp(-n_i h - n_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}{\exp(-h - \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}. \quad (2.41)$$

Isto implica uma população média (como definida na seção anterior) $N_i^{\text{eq}} = f_{FD,i}(1)$:

$$N_i^{\text{eq}} = \frac{\exp(-h - \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}{1 + \exp(-h - \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)} \quad (2.42)$$

$$= [1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)]^{-1}. \quad (2.43)$$

Este constitui o resultado fundamental desta seção.

2.3 Obtenção das Equações Macrodinâmicas

A obtenção das equações Macrodinâmicas para o ACGR segue um roteiro muito parecido com a obtenção destas para gases reais. A teoria cinética lida com esta última situação. Por isso, é de interesse resumir este roteiro e em seguida aplicá-lo para o ACGR com as modificações necessárias.

2.3.1 Teoria Cinética

A teoria cinética não se ocupa da descrição detalhada do movimento de cada partícula[32]. A quantidade de interesse é a distribuição $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ tal que

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v$$

é o número de partículas cuja posição está num volume d^3r em torno de $\mathbf{r}$ e cuja velocidade se encontra num intervalo de volume d^3v em torno de $\mathbf{v}$ no tempo t . Na realidade, esta é uma descrição estatística e, portanto, trata-se de um número médio. Porém, como ocorre na mecânica estatística, o desvio padrão costuma ser muito pequeno para sistemas macroscópicos.

O objetivo da teoria cinética é achar a função de distribuição $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ para uma dada situação [32]. Através desta função se consegue passar de uma descrição microscópica para a macroscópica. Por exemplo, obtém-se as equações de Navier-Stokes partindo da descrição de como as componentes de um gás interagem.

A forma com que f varia no espaço e no tempo depende da maneira como as partículas interagem e sua descrição é dada através de uma complicada equação integro-diferencial, isto é, a equação do transporte de Boltzmann [32]. Para chegar a esta, é necessário assumir como válida a aproximação de caos molecular, ou seja, a aproximação de que as partículas que participam de uma colisão não estão correlacionadas. A solução estacionária é a distribuição de Maxwell-

Boltzmann. Por meio do teorema H de Boltzmann, mostra-se que esta também é a distribuição de equilíbrio, ou seja, que uma distribuição qualquer eventualmente convergirá para a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Na realidade, esta é uma afirmação estatística aproximada, porém a sua probabilidade é extremamente alta em muitos casos de interesse físico [32].

Para se chegar às equações do escoamento é necessário definir quantidades hidrodinâmicas. Assim, temos a densidade ρ e a velocidade média $\mathbf{u}$ (ou velocidade hidrodinâmica):

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, \quad (2.44)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\int \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v}{\rho}. \quad (2.45)$$

Como era de se esperar, são raras as situações em que se conhecem as soluções não estacionárias exatas da equação de transporte de Boltzmann. Uma alternativa é fazer uma espécie de teoria de perturbação denominada de método de Chapman-Enskog [32]. Este método consiste em fazer aproximações sucessivas da distribuição, considerando a solução próxima da situação de equilíbrio. Sua principal contribuição é definir as equações factíveis de serem resolvidas para cada ordem de aproximação de maneira consistente. Através deste método pode-se obter a equação de Navier-Stokes para as quantidades (2.44) e (2.45) definidas acima.

2.3.2 Equações Microdinâmicas

Seja uma um subconjunto finito de uma rede de Bravais L que possui as seguintes características:

- Para cada par $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ existe uma elemento no grupo de isometrias G (grupo "cristalográfico") que globalmente preserva o conjunto de velocidades e que mapeia $\mathbf{c}_i$ em $\mathbf{c}_j$.
- Para qualquer vetor velocidade $\mathbf{c}_i$, denotaremos por G_i o subgrupo de G que não transforma $\mathbf{c}_i$, ou seja, deixa o hiperplano ortogonal, Π_i globalmente invariante. Assumimos

também que: (a) não existem vetores, com magnitude diferente de zero invariante sob todos os elementos de G_i e (b) a única transformação dentro do espaço P_i comutando com todos os elementos de G_i é proporcional à identidade.

A importância destas restrições está na consequência para os tensores definidos na rede. Estas propriedades serão utilizadas ao longo desta seção e estão demonstradas nas Refs. [15, 16]:

- **P1:** O conjunto de velocidade é invariante sob inversão espacial.
- **P2:** Tensores de segunda ordem são isotrópicos.
- **P3:** Seja:

$$C_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^n = \sum_i c_{i\alpha_1} c_{i\alpha_2} \dots c_{i\alpha_n}.$$

Para n ímpar este tensor é nulo. Para $n = 2$:

$$\sum_i c_{i\alpha_1} c_{i\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta},$$

onde b_m é o número de partículas permitidas por sítios com velocidade diferente de zero, c é o módulo velocidade da partícula, D é a dimensão da rede e δ é o delta de Kronecker.

Os nós são localizados pela variável $\mathbf{x}$ (note que $\mathbf{x}$ é uma variável discreta) e seus vizinhos são descritos por $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$. O estado da célula i do sítio $\mathbf{x}$ no tempo t é descrito pela variável booleana $n_i(\mathbf{x}, t)$ que é igual à 1 caso haja uma partícula nesta célula e igual à 0 caso contrário. Em cada sítio há b células, sendo b_m associadas às partículas com velocidade diferente de zero e b_r referente às partículas paradas ($b = b_m + b_r$). O nó como um todo é descrito pela variável $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$. A evolução se escreve como

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \Delta_i(\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.46)$$

onde Δ é a função de colisão e só assume os valores -1, 0 ou 1. Vamos considerar que a colisão se dá antes da propagação (a ordem é irrelevante, mas ajuda na descrição). Assim, quando $\Delta = 0$, a colisão não afeta a partícula associada à célula i . Se, $n_i(\mathbf{x}, t) = 1$, mas depois da colisão passou a ser 0, então Δ assume o valor -1. No caso inverso, $n_i(\mathbf{x}, t) = 0$, mas passou a ser 1 depois da colisão, $\Delta = 1$.

O operador de colisão Δ_i deve ter como restrições:

$$\sum_i \Delta_i(\mathbf{n}) = 0, \quad \forall \mathbf{n}, \quad (2.47)$$

e

$$\sum_i \mathbf{c}_i \Delta_i(\mathbf{n}) = 0, \quad \forall \mathbf{n}, \quad (2.48)$$

que implicam a conservação do número de partículas e do momento:

$$\sum_i \mathbf{n}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i \mathbf{n}_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.49)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{n}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{n}_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.50)$$

Outra forma de escrever a evolução (2.46) é

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_{s, s'} s'_i \xi_{s, s'} \prod_j n_j^{s_j} \bar{n}_j^{\bar{s}_j}, \quad (2.51)$$

onde

$$\langle \xi_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \rangle = A(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}'). \quad (2.52)$$

$A(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}')$ é a taxa de transição definida na Seção anterior, $\langle \rangle$ denota o valor médio, $\bar{n}_j = 1 - n_j$ e $\bar{s}_j = 1 - s_j$ (a barra em cima da variável significa 1 menos a esta). Assim, toda a informação contida na colisão pode ser expressa por ξ .

Outra maneira de escrever é deixando explícito o termo de colisão:

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{s,s'} (s'_i - s_i) \xi_{s,s'} \prod_j n_j^{s_j} \bar{n}_j^{\bar{s}_j}. \quad (2.53)$$

2.3.2.1 O Exemplo do Modelo FHP

No FHP-I a rede é triangular, $b = b_m = 6$, $b_r = 0$, $\mathbf{c}_i = (\cos i \frac{\pi}{3}, \sin i \frac{\pi}{3})$, e o conjunto de regras mais simples que se pode usar é a composta por colisão com duas e com três partículas, de modo que [14]

$$\Delta_i = \Delta_i^{(2)} + \Delta_i^{(3)}. \quad (2.54)$$

Para a colisão envolvendo três partículas:

$$\Delta_i^{(3)} = n_{i+1} n_{i+3} n_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+4} - n_i n_{i+2} n_{i+4} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+5}, \quad (2.55)$$

onde $\bar{n}_i = 1 - n_i$ é a operação de negação, o subscrito deve ser entendido como sendo o resto da divisão de i por 6 ($i \bmod 6$). Por exemplo, n_8 deve ser entendido como n_2 , pois o resto da divisão de 8 por 6 é 2.

Para a colisão com duas partículas:

$$\Delta_i^{(2)} = \xi n_{i+1} n_{i+4} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+5} + \bar{\xi} n_{i+2} n_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+4} - n_i n_{i+3} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+4} \bar{n}_{i+5}. \quad (2.56)$$

A variável booleana ξ é aleatória e toma o valor 1 quando a colisão deve ser uma rotação no sentido horário e 0 quando no sentido contrário.

2.3.3 Aproximação de Boltzmann

A aproximação necessária para continuarmos o desenvolvimento é considerar que as partículas participantes de uma colisão não têm correlação. Esta é uma versão para os modelos de ACGR do caos molecular da teoria cinética tradicional. Uma das conseqüências desta aproximação é o estabelecimento mais preciso do teorema H para o ACGR [16]. Diferente do resultado tradicional, a distribuição de equilíbrio não será a de Maxwell-Boltzmann e sim a de Fermi-Dirac como vimos na seção anterior. Um dos motivos para tal fato é o princípio de exclusão implícita na construção do autômato.

A versão para o ACGR da aproximação de caos molecular (a aproximação de Boltzmann) é que para qualquer combinação de partículas $a, b, \dots, x$ entrando numa colisão:

$$\langle n_a n_b \dots n_x \rangle = \langle n_a \rangle \langle n_b \rangle \dots \langle n_x \rangle. \quad (2.57)$$

Fazendo uma média da Eq. (2.53) com esta aproximação obtem-se

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Delta_i[\mathbf{N}(\mathbf{x}, t)], \quad (2.58)$$

onde $\Delta_i[\mathbf{N}]$ satisfaz:

$$\Delta_i[\mathbf{N}] = \sum_{s, s'} (s'_i - s_i) A(s \rightarrow s') \prod_j N_j^{s_j} \bar{N}_j^{\bar{s}_j}. \quad (2.59)$$

Esta é a equação de *lattice-Boltzmann* e tem a mesma interpretação da equação de transporte de Boltzmann. Esta equação é o ponto de partida dos métodos de *lattice-Boltzmann* [16].

As soluções estacionárias desta equação já foram estabelecidas num contexto mais geral. Porém, outro meio de estabelecê-la é através da solução estacionária da versão do ACGR para a equação de Boltzmann, de maneira análoga ao que se faz na teoria cinética. O seguinte teorema é demonstrado na Ref. [15]

Teorema 2.3. *Considere um modelo de ACGR com balanceamento semi-detalhado. As segin-*

tes afirmações são equivalentes:

1. O vetor $\mathbf{N}$ é uma solução da equação lattice-Boltzmann, ou seja

$$\Delta_i[\mathbf{N}] = 0 \quad \text{para todo } i.$$

2. A expressão seguinte vale sempre que $A(s \rightarrow s') > 0$:

$$\prod_j N_j^{s_j} \overline{N_j^{s_j}} = \prod_j N_j^{s'_j} \overline{N_j^{s'_j}}.$$

3. O vetor $\mathbf{N}$ pode ser escrito como a distribuição de Fermi-Dirac:

$$N_i = \frac{1}{1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}.$$

A demonstração de que (2) implica (3) assume que não há invariantes espúrias. Lembramos que assumimos que as invariantes espúrias de "Zanetti" têm influência desprezível.

Por meio da aproximação de Boltzmann também se estabelecem versões do teorema H. Este afirma que a informação do sistema decresce ou permanece constante no tempo. O estado de mínima informação se estabelece quando vale a distribuição de Fermi-Dirac. Em outras palavras, o teorema H nos permite afirmar que dado um tempo suficientemente longo, é extremamente provável que a distribuição será a de Fermi-Dirac. Mas não diz o quanto se deve esperar, nem dá a certeza que se chegará à distribuição de equilíbrio.

2.3.4 A Expansão de Chapman-Enskog

Definimos as médias de população da célula i por

$$N_i(\mathbf{x}, t) = \langle n_i(\mathbf{x}, t) \rangle. \quad (2.60)$$

No método de Chapman-Enskog, a distribuição é aproximadamente a de equilíbrio e por isso faz-se uma expansão em torno desta:

$$N_i = N_i^{(0)} + N_i^{(1)} + \dots N_i^{(n)} + \dots \quad (2.61)$$

onde $N_i^{(0)} \equiv N_i^{(eq)}$.

Considera-se que a distribuição depende do tempo através da densidade e da velocidade hidrodinâmica. Estas últimas é que são funções explícitas do tempo. Todas estas quantidades variam suavemente no espaço e no tempo. Suave aqui significa que sua variação espacial é negligenciável em uma distância comparável com o livre caminho médio e com um tempo comparável ao tempo médio entre colisões. Além disso, requer que a massa e momento sejam determinados apenas pela ordem 0 da expansão. Assim, para a densidade de partículas teremos:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{b_m} N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + b_r N_0^{(0)}, \quad (2.62)$$

$$\sum_{i=1}^{b_m} N_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) + b_r N_0^{(n)} = 0, \quad n > 0. \quad (2.63)$$

Para a densidade de momento:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{c}_i N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t), \quad (2.64)$$

e

$$\sum_i \mathbf{c}_i N_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad n > 0. \quad (2.65)$$

Como antes, a velocidade fica determinada através da equação:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (2.66)$$

Estas definições e as relações (2.49) e (2.50) implicam que

$$\sum_i N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i N_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.67)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_i \mathbf{c}_i N_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.68)$$

No entanto, ainda não sabemos quem é h ou $\mathbf{q}$, e portanto não temos N_i^{eq} . Para tanto, usa-se as relações (2.62) e (2.64). Porém, se aplicado diretamente, seu resultado não é esclarecedor. O que se faz então é uma expansão em série de potência da expressão de N_i^{eq} e, finalmente, usa-se as relações de massa e de momento para obter a distribuição de equilíbrio apenas em função de ρ e $\mathbf{u}$. Daremos prosseguimento explícito em seguida.

2.3.5 Distribuição de Equilíbrio até Segunda Ordem

Seja a distribuição de equilíbrio:

$$N_i^{\text{eq}} = \frac{1}{1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)}. \quad (2.69)$$

Expandiremos em Taylor h e $\mathbf{q}$ em função de $\mathbf{u}$ e em torno de $\mathbf{u} = 0$, notando que $\mathbf{u} \rightarrow -\mathbf{u}$ junto com $\mathbf{c}_i \rightarrow -\mathbf{c}_i$, deve deixar a distribuição invariante:

$$h(\rho, -\mathbf{u}) = h(\rho, \mathbf{u}) \quad , \quad \mathbf{q}(\rho, -\mathbf{u}) = -\mathbf{q}(\rho, \mathbf{u}), \quad (2.70)$$

e que

$$\mathbf{u} = 0 \Rightarrow h = \frac{\rho}{b}, \quad (2.71)$$

ou seja,

$$h(\rho, -\mathbf{u}) = h_0 + h_2 u^2 + O(u^4), \quad (2.72)$$

$$\mathbf{q} = q_1 \mathbf{u} + O(u^3), \quad (2.73)$$

onde h_0, h_2 e q_1 dependem de ρ , u é o módulo de $\mathbf{u}$ e $O(u^n)$ reúne todos os termos de ordem maior ou igual a n . Na realidade, h_2 e q_1 são tensores de segunda ordem. Porém, a propriedade **P2** afirma que tensores de segunda ordem que obedecem às simetrias da rede são isotrópicos e por isso podem ser substituídos por escalares [16, 15].

Agora, expandiremos em Taylor a função

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^x}. \quad (2.74)$$

em torno de $x = h_0$, ou seja, em torno de $\mathbf{u} = 0$:

$$N_i^{\text{eq}} = F(h_0) + F'(q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2} F''(h_0) q_1^2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i)^2 + O(u^3). \quad (2.75)$$

Note que $F(h_0) = \frac{\rho}{b}$ e $F' = -F(1 - F)$. Definindo $f = \frac{\rho}{b}$ para simplificar a notação e desprezando termos de ordem maior ou igual a $O(u^3)$, tem-se que

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 - (1 - f)(q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2} (1 - f)(1 - 2f) q_1^2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i)^2 \right]. \quad (2.76)$$

Lembramos que sub-índices com letras gregas representam as componente de vetores ou tensores. Por exemplo u_α é a α -ésima componente de $\mathbf{u}$. Além disto usaremos a notação de Einstein:

$$u_\alpha v_\alpha \equiv \sum_\alpha u_\alpha v_\alpha. \quad (2.77)$$

Lembramos a definição de $C_{\alpha_1, \dots, \alpha_r}^{(r)}$ fornecida na propriedade **P3**:

$$C_{\alpha_1, \dots, \alpha_r}^{(r)} = \sum_i c_{i\alpha_1} \dots c_{i\alpha_r} \quad (2.78)$$

e que para r ímpar este tensor é nulo. Agora, substituindo (2.76) em (2.62) (definição da densidade) resulta:

$$0 = -f\bar{f}q_1 u_\alpha C_\alpha^{(1)} + \left(\frac{1}{2} f\bar{f}(1-2f)q_1^2 C_{\alpha\beta}^{(2)} - b_m f\bar{f}h_2 \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta - b_r f\bar{f}h_2 u^2; \quad (2.79)$$

ou

$$0 = \left(\frac{1}{2} f\bar{f}(1-2f)q_1^2 \frac{b_m c^2}{D} - b f\bar{f}h_2 \right) u^2. \quad (2.80)$$

Por outro lado, substituindo (2.76) em (2.64) (momento) resulta:

$$\rho u_\alpha = f C_\alpha^{(1)} - f\bar{f}q_1 u_\beta C_{\alpha\beta}^{(2)} + \left(\frac{1}{2} f\bar{f}(1-2f)q_1^2 C_{\alpha\beta\Lambda}^{(3)} - b_m f\bar{f}h_2 C_\alpha^{(1)} \delta_{\beta\Lambda} \right) u_\beta u_\Lambda; \quad (2.81)$$

ou

$$\rho u_\alpha = -f\bar{f}q_1 \frac{b_m c^2}{D} u_\alpha. \quad (2.82)$$

Assim:

$$q_1 = -\frac{\rho D}{f\bar{f}b_m c^2}. \quad (2.83)$$

Usando q_1 em (2.80)

$$0 = \frac{1}{2}(1-2f) \frac{D}{f\bar{f}b_m c^2} \rho^2 - b f\bar{f}h_2, \quad (2.84)$$

$$h_2 = \frac{1}{2\bar{f}} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{bD}{b_m c^2}, \quad (2.85)$$

resultando em

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 + \frac{Db}{c^2 b_m} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{1}{2} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{bD}{b_m c^2} u^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{b^2 D^2}{b_m^2 c^4} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3); \quad (2.86)$$

ou, de uma maneira conveniente para procedimentos posteriores:

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 + \frac{Db}{c^2 b_m} c_{i\alpha} u_\alpha + G(f) \frac{b^2}{b_m^2} \left(Q_{i\alpha\beta} + \frac{c^2 b_r}{Db} \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3), \quad (2.87)$$

e para a célula associada a partícula parada:

$$N_0^{\text{eq}} = f \left[1 - G(f) \frac{c^2 b}{Db_m} u^2 \right] + O(u^3), \quad (2.88)$$

onde

$$G(f) = \frac{1}{2} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{D^2}{c^4}, \quad (2.89)$$

e

$$Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.90)$$

2.3.6 Primeira Ordem do Método Chapman-Enskog:

A Equação de Euler

Finalmente, estamos em posição de descrevermos como será feito a transição da escala microscópica para a macroscópica. É necessário fazer uma passagem do discreto para o contínuo. Isto se dá assumindo que $N_i(\mathbf{x}, t)$ é uma função contínua cuja variação é muito pequena para a distancia de uma unidade de rede ou de um passo de tempo. Deste modo, é possível transformar a equação discreta de Boltzmann em uma contínua. Por exemplo, expandindo N_i em Taylor até

primeira ordem, teremos

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - N_i(\mathbf{x}, t) \approx c_{i\alpha} \nabla_\alpha N_i(\mathbf{x}, t) + \partial_t N_i(\mathbf{x}, t) (1) \quad (2.91)$$

Assim, transforma-se uma diferença numa derivada. Lembramos que N_i só depende do tempo implicitamente.

O método de Chapman-Enskog define equações diferenciais para os termos de mesma ordem. Os termos de ordem superiores não influenciam as equações de ordens inferiores. A n -ésima aproximação da distribuição $N_i^{(n)}$ é de mesma ordem da derivada ∇^n do termo $N_i^{(0)}$. No entanto, para se obter consistência no método é necessário usar uma expansão múltipla da derivada temporal [32, 15]:

$$\partial_t = \partial_{t_1} + \partial_{t_2} + \dots \quad (2.92)$$

onde a derivada ∂_{t_n} é da ordem de $O(\nabla^n)$. Por exemplo, até primeira ordem teremos:

$$\begin{aligned} N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = & N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + N_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \nabla_\alpha N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) c_{i\alpha} + \\ & + \partial_{t_1} N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) (1) + O(\nabla^2) \end{aligned} \quad (2.93)$$

Notamos que não há derivadas em $N_i^{(1)}(\mathbf{x}, t)$ e nem derivada temporal ∂_{t_2} , pois estes são de ordem $O(\nabla^2)$.

Para ordem zero, a Equação de Boltzmann é:

$$0 = \Delta_i[\mathbf{N}^{(0)}] \quad (2.94)$$

O que era de se esperar, já que $\mathbf{N}^{(0)}$ é a uma solução estacionária da equação. Isto sugere linearizar o operador Δ :

$$\Delta_i[\mathbf{N}] \approx \Lambda_{ij} N_j \quad (2.95)$$

onde Λ_{ij} é um operador linear. Esta aproximação deve ser considerada de ordem um $O(\nabla^1)$.

Além disto, lembramos que:

$$\sum_i \Delta_i[\mathbf{N}] = 0, \quad (2.96)$$

e

$$\sum_i \mathbf{c}_i \Delta_i[\mathbf{N}] = 0, \quad (2.97)$$

em qualquer ordem da expansão. Disto segue que para $\mathbf{N} = \mathbf{N}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{X}$, ε um número pequeno, Λ_{ij} deve satisfazer:

$$\sum_i \Lambda_{ij} X_j = 0, \quad (2.98)$$

e

$$\sum_i \mathbf{c}_i \Lambda_{ij} X_j = 0. \quad (2.99)$$

Assim, em primeira ordem, a equação de Boltzmann é

$$\partial_{t1} N_i^{(0)} + c_{i\beta} \nabla_\beta N_i^{(0)} = \sum_j \Lambda_{ij} N_j^{(1)}. \quad (2.100)$$

Fazendo o somatório sobre i :

$$\partial_{t1} \sum_i N_i^{(0)} + \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)} = 0, \quad (2.101)$$

pois $\sum_{ij} \Lambda_{ij} N_j^{(1)} = 0$ De outro modo:

$$\partial_{t1} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (2.102)$$

A equação da continuidade é satisfeita em primeira ordem.

Multiplicando por $c_{i\alpha}$ e fazendo o somatório em i :

$$\partial_{t1} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(0)} + \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(0)} = \sum_{ij} c_{i\alpha} \Lambda_{ij} N_j^{(1)} = 0 \quad (2.103)$$

Definindo

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \quad (2.104)$$

como o tensor do fluxo de momento, a equação acima nos fornece:

$$\partial_{t1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} = 0. \quad (2.105)$$

Usando as Eqs. (2.87) e (2.88) nesta expressão chegaremos a uma equação bastante próxima da de Euler. No entanto, temos a presença do tensor de quarta ordem $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$. Este tensor é isotrópico dependendo do modelo e sua influência se faz presente principalmente no tensor fluxo de momento. Como as equações hidrodinâmicas são isotrópicas, é necessário que este tensor também o seja. Neste caso, mostra-se que este tem o seguinte formato [15, 16]:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}). \quad (2.106)$$

Considerando este resultado, chega-se a [16]

$$\partial_{t1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta [g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha [p(\rho, u^2)], \quad (2.107)$$

onde

$$g(\rho) = \frac{bD}{b_m(D+2)} \frac{1 - 2\rho/b}{1 - \rho/b}, \quad (2.108)$$

$$p(\rho, u^2) = c_s^2 \rho - \rho g(\rho) \frac{c_s^2}{c^2} \left(1 + \frac{D}{2} - \frac{c^2}{2c_s^2} \right) u^2, \quad (2.109)$$

e

$$c_s = \frac{b_m c^2}{bD}.$$

A Eq. (2.107) é identificada como a equação de Euler para densidade constantes (não esquecendo de absorver $g(\rho)$ na velocidade). Na realidade, estudos baseados na expansão do número de Mach [16] justificam que pequenas variações na densidade são irrelevantes exceto no termo de pressão (2.109) [15]. Assim, a densidade pode ir para fora das derivadas. O mesmo não acontece quando consideramos escoamentos compressíveis, pois a densidade permanece dentro das derivadas e não obtemos a identificação com a equação de Euler. Este argumento também justifica o mesmo procedimento em relação ao que será efetuado para obter equação de Navier-Stokes.

2.3.7 Segunda Ordem do Método Chapman-Enskog:

A equação de Navier-Stokes

A expansão de segunda ordem do método de Chapman-Enskog nos fornece:

$$\begin{aligned} & \left[N_i^{(0)}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - N_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + N_i^{(1)}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - N_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right]^{(2)} \\ &= \sum_j \Lambda_{ij} N_j^{(2)} + \frac{1}{2} \sum_{jk} \frac{\partial^2 \Delta + i}{\partial N_j \partial N_k}, \end{aligned} \quad (2.110)$$

onde $[\dots]^{(2)}$ significa que só há termos de ordem 2. Análogo à primeira ordem, é necessário que

$$\sum_i \left(\sum_j \Lambda_{ij} N_j^{(2)} + \frac{1}{2} \sum_{jk} \frac{\partial^2 \Delta_i}{\partial N_j \partial N_k} \right) = 0, \quad (2.111)$$

e

$$\sum_i c_{i\alpha} \left(\sum_{ij} \Lambda_{ij} N_j^{(2)} + \frac{1}{2} \sum_{jk} \frac{\partial^2 \Delta + i}{\partial N_j \partial N_k} \right) = 0. \quad (2.112)$$

Coletando os termos de segunda ordem na expansão em Taylor de $N_i^{(0)}$ e os de primeira ordem

na expansão de $N_i^{(1)}$, fazendo o somatório em i na Eq. (2.110), teremos

$$\begin{aligned} & \partial_{t_2} \sum_i N_i^{(0)} + \\ & + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} \sum_i N_i^{(0)} + \partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \nabla_\beta \nabla_\gamma \sum_i c_{i\beta} c_{i\gamma} N_i^{(0)} + \\ & + \partial_{t_1} \sum_i N_i^{(1)} + \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (2.113)$$

A ultima linha desaparece por meio de (2.63) e (2.65). Segue da Eq. (2.101) que

$$\frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} \sum_i N_i^{(0)} = -\frac{1}{2} \partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)}$$

E a segunda linha de (2.113) é reescrita como

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \partial_{t_1} \left(-\partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)} + \partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)} \right) \\ & + \frac{1}{2} \nabla_\beta \left(\partial_{t_1} \sum_i c_{i\beta} N_i^{(0)} + \nabla_\gamma \sum_i c_{i\beta} c_{i\gamma} N_i^{(0)} \right). \end{aligned}$$

O primeiro parenteses desaparece por motivos óbvios e o que está dentro do segundo desaparece usando-se Eq. (2.103). Deste modo,

$$\partial_{t_2} \rho = 0. \quad (2.114)$$

Isto significa que

$$\partial_{t_1} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) + O(\nabla^3) = 0, \quad (2.115)$$

ou seja, a equação da continuidade é válida até segunda ordem.

Na mesma ordem, fazendo o somatório em i com $c_{i\alpha}$ na Eq. (2.110), teremos:

$$\partial_{t_2} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(0)} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(0)} + \partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \nabla_\beta \nabla_\gamma \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} N_i^{(0)} + \\
& + \partial_{t_1} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(1)} + \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(1)} = 0.
\end{aligned} \tag{2.116}$$

O primeiro termo é igual a $\partial_{t_2} \rho u_\alpha$. O quinto é igual à zero. É interessante dividir por dois o terceiro termo e reescrever a equação acima na forma:

$$\begin{aligned}
& \partial_{t_2} \sum_i \rho u_\alpha + \\
& + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(0)} + \\
& + \frac{1}{2} \nabla_\beta \partial_{t_1} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(0)} + \frac{1}{2} \nabla_\beta \nabla_\gamma \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} N_i^{(0)} + \\
& + \partial_{t_1} \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(1)} + \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{(1)} = 0.
\end{aligned} \tag{2.117}$$

A segunda linha é a derivada da Eq. (2.103) e por isso é nula. A terceira linha pode ser reorganizada na forma:

$$\frac{1}{2} \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(\partial_{t_1} N_i^{(0)} + \nabla_\gamma \sum_i c_{i\gamma} N_i^{(0)} \right).$$

O que ficou entre parenteses coincide com a equação de Boltzmann em primeira ordem (Eq. (2.100)). Através de uma algebra massante, este termo pode ser transformado usando as distribuições de equilíbrio (2.87) e (2.88) junto com a equação de Euler para o autômata (2.107) chegando à expressão [16]:

$$\partial_{t_1} N_i^{(0)} + \nabla_\alpha \sum_i c_{i\alpha} N_i^{(0)} = \left(\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \nabla_\beta (\rho u_\alpha). \tag{2.118}$$

$Q_{i\alpha\beta}$ corresponde à Eq. (2.90) e todos os outros termos já foram definidos. Note que na equação de Euler (2.107) está implícito que a rede satisfaz a condição de isotropia dos tensores

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^4.$$

O termo $N_i^{(1)}$ pode ser obtido a partir da Eq. (2.118), junto a sua versão para partículas paradas e o operador de colisão de primeira ordem Λ_{ij} . Considerar as simetrias facilita o trabalho. Assim, chega-se a [16]:

$$N_i^{(1)} = (\psi Q_{i\alpha\beta} - X \delta_{\alpha\beta}) \nabla_\beta (\rho u_\alpha), \quad (2.119)$$

$$N_0^{(1)} = b_m X \delta_{\alpha\beta} \nabla_\beta (\rho u_\alpha), \quad (2.120)$$

onde ψ e X depende do operador Λ . Com isto, obtém-se

$$\begin{aligned} \partial_{t_2} (\rho u_\alpha) + \frac{1}{2} \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\gamma\delta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\gamma\delta} \right) \nabla_\gamma (\rho u_\delta) \\ + \nabla_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} (\psi Q_{i\gamma\delta} - X \delta_{\gamma\delta}) \nabla_\delta (\rho u_\gamma). \end{aligned} \quad (2.121)$$

Lembrando que $Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}$, chegaremos ao tensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^4$ novamente. Como antes, admitiremos sua isotropia. Fazendo isto, chega-se a [16]:

$$\partial_{t_2} (\rho u_\alpha) = \nabla_\beta \{v [\nabla_\beta (\rho u_\alpha) + \nabla_\alpha (\rho u_\beta)]\} + \nabla_\alpha [v_2 \nabla_\beta (\rho u_\beta)]. \quad (2.122)$$

onde v e v_2 dependem de ψ e X . Lembrando com a Eq. (2.107), chegamos finalmente a

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \nabla_\beta [g(\rho) \rho u_{\alpha\beta}] = -\nabla_\alpha [p(\rho, u^2)] \nabla_\beta \{v [\nabla_\beta (\rho u_\alpha) + \\ \nabla_\alpha (\rho u_\beta)] + \nabla_\alpha [v_2 \nabla_\beta (\rho u_\beta)], \end{aligned} \quad (2.123)$$

que é a equação de Navier-Stokes quando a variação de densidade é desprezível.

2.4 Escoamento de Poiseuille

O escoamento de Poiseuille é a solução estacionária do seguinte problema [27]: seja um canal formado por placas paralelas de largura d (direção $\hat{y}$). Considere este escoamento bidimensional, ou seja, que a velocidade é invariante na terceira dimensão (direção $\hat{z}$). Nas paredes da placa é aplicada a condição de contorno de não deslizamento, e a direção longitudinal (direção $\hat{x}$) é periódica. O gradiente de pressão cinemática tem modulo constante G e direção $\hat{x}$. Por fim, seja ν o coeficiente de viscosidade cinemática.

Este é um problema simples de se resolver. As equações que o governam são:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (\text{Navier-Stokes})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (\text{Continuidade})$$

A derivada temporal é nula porque estamos considerando a situação estacionária. Além disto, note que apenas direção $\hat{x}$ de $\mathbf{u}$ não é nulo e que só depende de y por causa da simetria na direção longitudinal. A equação acima simplifica para:

$$(\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = G \hat{x} + \nu \nabla^2 \mathbf{u},$$

ou:

$$0 = G + \nu \partial_y^2 u_x(y).$$

considerando $u_x(y) = 0$ para $y = -d/2$ e $y = d/2$, obtemos:

$$u_x(y) = \frac{G}{2\nu} \left(\frac{d^2}{4} - y^2 \right). \quad (2.124)$$

2.4.1 Resultado da Simulação

O modelo utilizado é o de 7 velocidades com colisão aleatória. Este é idêntico aos modelos FHP-II ou FHP-III a não ser pelo operador colisão que escolhe o estado pós-colisão do sítio de maneira aleatória com a mesma probabilidade para todas as configurações que conservem a massa e o momento, incluindo a possibilidade de escolher a configuração de pré-colisão. Para resultados preliminares com o modelo FHP-I, veja Ref. [33]. Os códigos dos programas utilizados nesta dissertação são modificações de um já existente em linguagem C disponível na internet [34] escrito para o modelo bidimensional ILG (vide Capítulo 3). Este só incluía as operações básicas do ACGR e fizemos várias modificações para acrescentar características como: obstáculos, forças, condições de contorno, cálculo das médias de densidade e de momento, entre outros. Além disto, este código serviu como base para implementar os diferentes modelos que serão descritos no próximo Capítulo.

Na simulação foi definida uma rede com dimensões de 40×40 sítios, (ou $40 \times 40 \sqrt{3}/2$ unidades de rede). A primeira e última linha foram marcadas como obstáculos com a condição de contorno de não deslizamento e a condição de contorno periódica foi aplicada na direção $\hat{x}$. A força foi aplicada na direção $\hat{x}$, da esquerda para a direita a uma taxa de força de 0,005 por sítio a cada passo de tempo (0,005 é o aumento médio de momento por sítio por passo de tempo). O valor de $u_x(y)$ foi calculado fazendo uma média de todos os sítios de uma mesma linha durante 1 milhão de passos, depois de alcançado o equilíbrio com 10 mil passos. Como havia 38 linhas, y varia de $-18,5 \frac{\sqrt{3}}{2}$ a $18,5 \frac{\sqrt{3}}{2}$. O perfil de velocidade é mostrado na figura 2.8 obtido para a densidade 0,5 partículas por célula (ou 3,5 partículas por sítio). O resultado se ajusta muito bem a uma parábola, como mostrado na Fig. 2.8.

Esta simulação também pode ser utilizada para estimar o coeficiente de viscosidade do modelo [35] e na simulação acima estimamos o valor de 0,19155 que concorda com os resultados teóricos encontrados em [16]. No entanto, o procedimento exato envolve algumas sutilezas. A primeira delas diz respeito a camada de Knudsen [35]. Não é possível definir exatamente onde

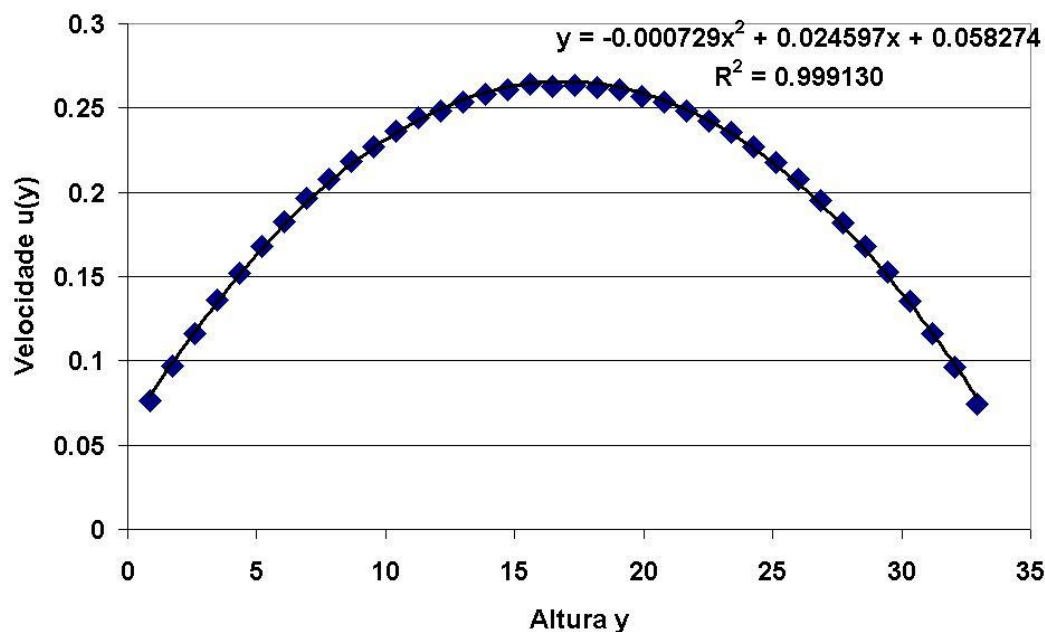


Figura 2.8 Perfil de velocidade da simulação do escoamento de Poiseuille. Densidade de 3,5 partículas por sítio

a velocidade se anula com a condição de não deslizamento como implementada. Esta incerteza é da ordem do livre caminho médio.

Outra sutileza diz respeito a maior dificuldade de colocar momento no meio do canal em relação às bordas. A aplicação da força depende da existência de sítios com configurações compatíveis. No meio do canal, existem mais partículas apontando para a direita do que nas bordas por causa da velocidade maior, sendo assim, existem mais sítios com configurações compatíveis nas bordas que no meio. Porém, este problema é relativamente fácil de superar, basta cuidar para que seja acrescentada a mesma quantidade de momento em cada linha. No entanto, o desvio observado é pequeno.

Modelos para Dois Fluidos

Os modelos de ACGR podem ser estendidos para casos complexos e de interesse físico. Para simular dois fluidos miscíveis basta etiquetar cada partícula com o nome do fluido a que pertence e deixar o sistema evoluir. Se considerarmos uma rede hexagonal, o sistema evolui como nos modelos de FHP com a diferença de que em cada sítio a colisão irá redistribuir a etiqueta entre as partículas. Vários trabalhos foram desenvolvidos nesta linha e diversos efeitos como a convecção foram observados [16]. Modificações neste esquema permite simular outros fenômenos como reações químicas em fluidos misturantes [16].

O caso de fluidos imiscíveis é o de maior interesse para esta dissertação. A diferença em relação ao modelo descrito acima é que a redistribuição das etiquetas das partículas em cada nó depende dos sítios vizinhos. Desta forma, pode-se fazer com que partículas de mesma etiqueta se agreguem.

O escoamento numa célula de Hele-Shaw é outro caso de interesse. Há outra extensão dos modelos de ACGR bidimensionais cujo comportamento pode ser descrito pelas equações que governam o escoamento em células de Hele-Shaw. Para tanto se usa "espalhadores" que invertam o momento em sítios aleatórios.

Na próxima Seção será descrito o modelo de gás na rede imiscível (*immiscible lattice gas*) introduzido em 1988 [19] para dois fluidos e serão reproduzidas várias simulações e resultados da literatura. Nas duas seções seguintes serão introduzidos os modelos para a célula de Hele-Shaw com um e dois fluidos imiscíveis, este último implementado de uma maneira que consideramos original. Faz-se então uma rápida descrição das instabilidades de Saffman-Taylor e se apresenta os resultados de nossas simulações. Na última Seção é apresentado um modelo

para escoamento em superfícies cônicas.

3.1 Modelo de Gás na Rede Imiscível

O modelo de Gás na Rede Imiscível ou ILG (*Immiscible Lattice Gas*) [19] é muito similar ao FHP. As únicas diferenças são: i) cada partícula tem uma cor para distinguir a qual fluido pertence (a cor substitui a idéia de etiqueta) e ii) a colisão depende das cores das partículas de um dado sítio e de seus vizinhos. Escolhemos as cores vermelha e azul para nos referir a cada fluido [19]. No entanto, algumas figuras apresentarão as cores verde e vermelha, a cor verde fazendo o papel da cor azul. As colisões nos sítios com partículas de mesma cor ocorrem da maneira usual. Nos sítios com partículas de cores diferentes, estas procuram a direção onde exista uma maior concentração de partículas da mesma cor na sua vizinhança. A Fig. 3.1 ilustra a colisão do ILG.

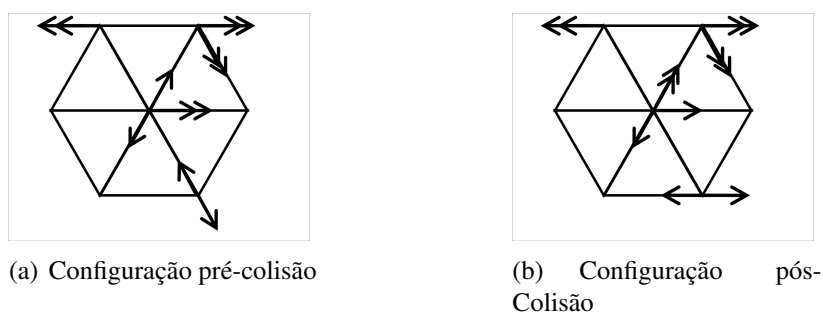


Figura 3.1 Colisão com cores. As setas simples e duplas indicam a cor vermelha e azul respectivamente. Note o que acontece ao sítio central.

De maneira mais formal [19], a cada sítio são associadas 14 células, 7 para cada tipo de partícula. Cada sítio fica representado com a notação abaixo:

$$\mathbf{s} = (\mathbf{r}, \mathbf{b}) = (r_0, b_0, \dots, r_6, b_6), \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{s}$ é a configuração local, (r_i) e (b_i) são variáveis booleanas correspondentes à existência

de partículas vermelhas e azuis, respectivamente, (r de *red* e b de *blue*). Os sub-índices dizem respeito à velocidade da partícula: de 1 a 6 são as partículas com velocidade $\mathbf{c}_i = (\cos i \frac{\pi}{3}, \sin i \frac{\pi}{3})$; 0 é a partícula parada ($\mathbf{c}_0 = (0, 0)$).

Novamente, em cada sítio existe no máximo uma partícula para uma dada velocidade. Por exemplo, se $b_2 = 1$, deve-se ter que $r_2 = 0$. Defini-se a variável booleana $n_i = b_i + r_i$ para indicar se para a velocidade i existe ou não uma partícula, independente da cor. Para estes modelos, a equação microdinâmica tem um formato ligeiramente diferente:

$$r_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = r'_i(\mathbf{x}, t), \quad b_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = b'_i(\mathbf{x}, t), \quad (3.2)$$

onde r'_i e b'_i representam as variáveis após a colisão.

A influência dos vizinhos é expressa através do vetor de gradiente de cor:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{c}_i \sum_j [r_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) - b_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)]. \quad (3.3)$$

Esta quantidade informa qual a direção de maior concentração de partículas vermelhas, ou, de outro modo, qual a direção de menor concentração de partículas azuis. Um vetor é também necessário para expressar a regra de colisão, o qual se denomina fluxo de cor:

$$\mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x}), \mathbf{b}(\mathbf{x})] = \sum_i \mathbf{c}_i [r_i(\mathbf{x}) - b_i(\mathbf{x})]. \quad (3.4)$$

Finalmente, dentre as configurações de pós-colisão possíveis, a escolhida é a que maximiza:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}', \mathbf{b}') \cdot \mathbf{f}. \quad (3.5)$$

Caso haja mais de uma configuração que maximize (3.5) a escolha será feita de maneira aleatória entre estas. A colisão deve conservar o momento total e a massa colorida, ou seja, o número

de partículas de cada cor:

$$\sum_i \mathbf{c}_i(r'_i + b'_i) = \sum_i \mathbf{c}_i(r_i + b_i), \quad (3.6)$$

$$\sum_i r'_i = \sum_i r_i, \quad \sum_i b'_i = \sum_i b_i. \quad (3.7)$$

O efeito da maximização da Eq. (3.5) é promover a agregação de partículas de uma mesma cor. Note que nos sítios onde só existam partículas de uma cor, o fluxo de cor $\mathbf{q}(\mathbf{r}', \mathbf{b}')$ é igual a mais ou menos o vetor momento e não varia com a colisão. Desta maneira, nas regiões onde há somente uma cor, a dinâmica é exatamente igual a dos modelos de FHP, sendo válidos todos os resultados que obtemos para este. Note também que a magnitude do gradiente de cor $\mathbf{f}$ também não é importante. Isto facilita a implementação computacional do modelo porque é possível discretizar apenas o ângulo. Para resultados preliminares, veja [36].

3.1.1 Separação de Fases

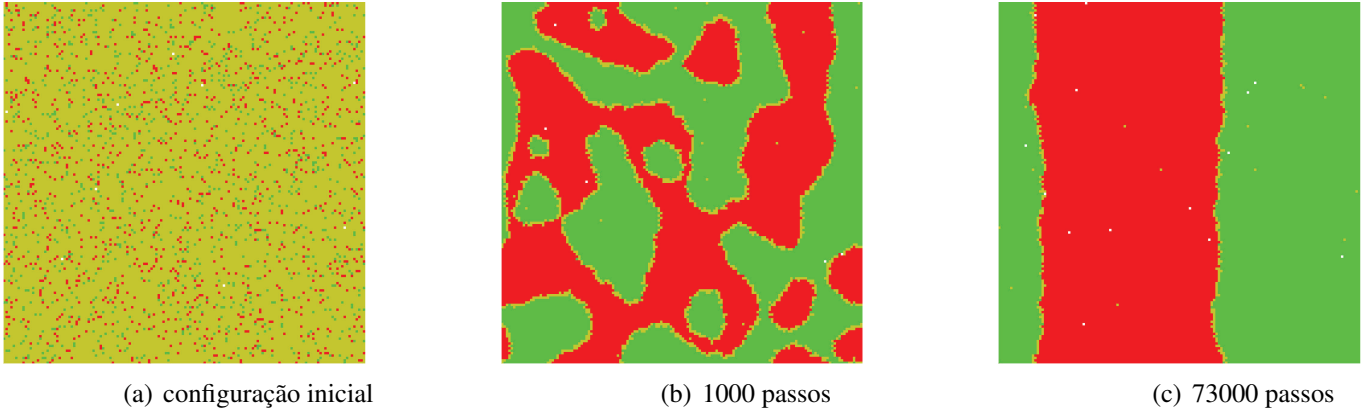


Figura 3.2 *Separação de fases*

A Fig. 3.2 mostra a separação de fases espontânea para um sistema inicialmente misturado. Para a simulação, utilizamos uma mistura 50% de partículas de cada cor (cada sítio tinha uma quantidade aleatória de partículas de ambas as cores), com densidade de 4,9 partículas

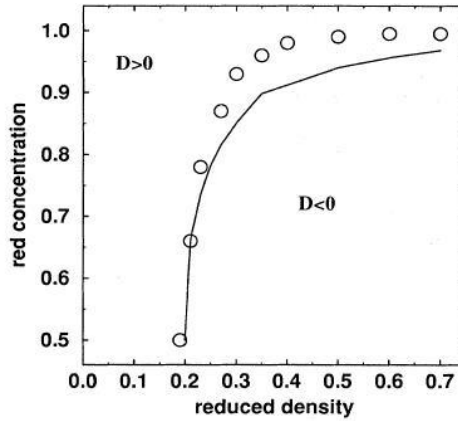


Figura 3.3 Gráfico da curva $D=0$ obtida pelo aproximação de Boltzmann e estimativas "empíricas" (círculos) no plano da concentração θ e densidade reduzida f (partículas por célula) [16].

por sítio, numa rede de 150×150 sítios com condições de contorno periódica na vertical e na horizontal. Não há forças atuando, nem paredes, e o momento total na rede é nulo. Nesta figura, a cor verde substitui a cor azul. A cor amarelada indica que nestes sítios há os dois tipos de partículas presentes, a cor vermelha indica que naquele sítio só temos partículas da cor vermelha e, a cor verde, apenas partículas verdes. Durante a evolução há formação de bolhas, culminando com um estado estacionário de fases separadas. O sistema rapidamente alcança uma situação em que há uma grande região vermelha, outra verde e uma única bolha vermelha na região verde. Esta bolha faz um movimento aleatório até encontrar a grande região vermelha e coalescer em uma única região.

Estudos detalhados deste fenômeno no ILG mostram que este é consistente com os modelos teóricos e experimentais da separação de misturas de fluidos em fases homogêneas (não misturadas) [16]. A fase misturada é estável dependendo da densidade de partículas e da concentração de uma das cores. A Fig. 3.3 [16] mostra um diagrama de fases. A linha separa a região quando a fase misturada é estável ($D > 0$) da região em que esta é instável ($D < 0$), onde D é o coeficiente de difusão na equação

$$\mathbf{J} = -D\rho\nabla\theta,$$

onde $\mathbf{J}$ é o corrente de concentração de um dos fluidos, θ é a concentração e ρ é a densidade. Para D positivo, partículas de mesma cor procuram se misturar com as de outra cor e para D negativo, partículas de mesma cor tendem a se agregar. Discussões mais detalhadas encontram-se em [16].

3.1.2 Lei de Laplace

Um dos efeitos mais importantes na dinâmica de dois fluidos imiscíveis são a tensão superficial e a descontinuidade da pressão descrita pela lei de Laplace. Não há motivos a priori que levem o ILG a estes efeitos. No entanto, testes numéricos mostram que o modelo de fato obedece a referida lei:

$$p_1 - p_2 = \sigma \kappa. \quad (\text{Lei de Laplace})$$

É interessante uma digressão sobre a tensão superficial no contexto do modelo. A região da interface é definida de maneira estatística e possui uma espessura diferente de zero. A velocidade das partículas que se encontram nesta região tende a se alinhar perpendicular a interface por causa da maximização de (3.5). Quando a interface é curva, por exemplo, na Fig. 3.4, este alinhamento implica uma densidade de partículas maior na região de dentro e menor na região de fora. Outra consequência é uma diminuição da densidade de partículas na região da interface. Nas Fig. 3.5 é mostrado o gráfico tridimensional da densidade de partículas versus a posição no plano. Cada ponto do gráfico corresponde a uma média na região de 4×4 sítios em 5 mil passos, depois de 5 mil passos para se alcançar uma situação aproximadamente estacionária. Observe a diminuição da densidade na interface e o aumento desta dentro do círculo. Lembre-se de que a pressão nos modelos FHP está relacionada linearmente com a densidade através da Eq. (2.109).

Fizemos simulações para verificar a lei de Laplace e obter estimativas da tensão superficial.

A configuração inicial é a de uma bolha circular vermelha ou azul no centro, com o resto da rede preenchida com a outra cor. A densidade de partículas é inicialmente uniforme por toda a rede. Não há forças aplicadas e o momento total da rede é nulo. Para garantir uma situação de equilíbrio, o sistema evolui durante 5 a 20 mil passos depois dos quais é feita uma média entre 3 a 20 mil passos na densidade de partículas vermelha e azuis (esta variação será explicada mais adiante). Em seguida conta-se o número de sítios dentro da bolha para se obter a área desta e, conseqüentemente, seu raio.

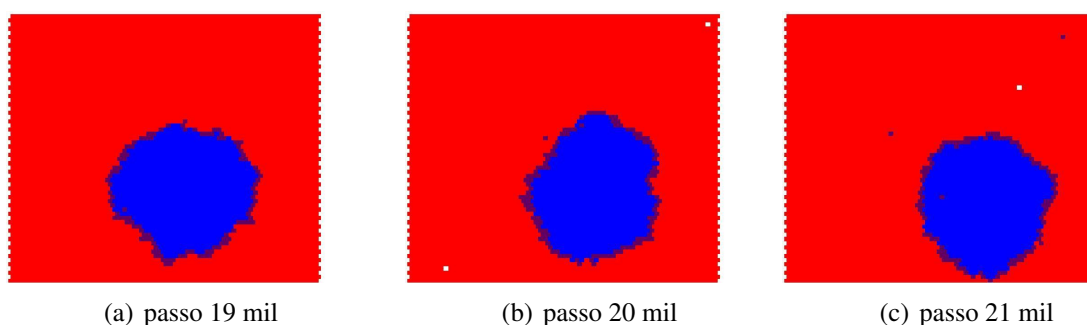
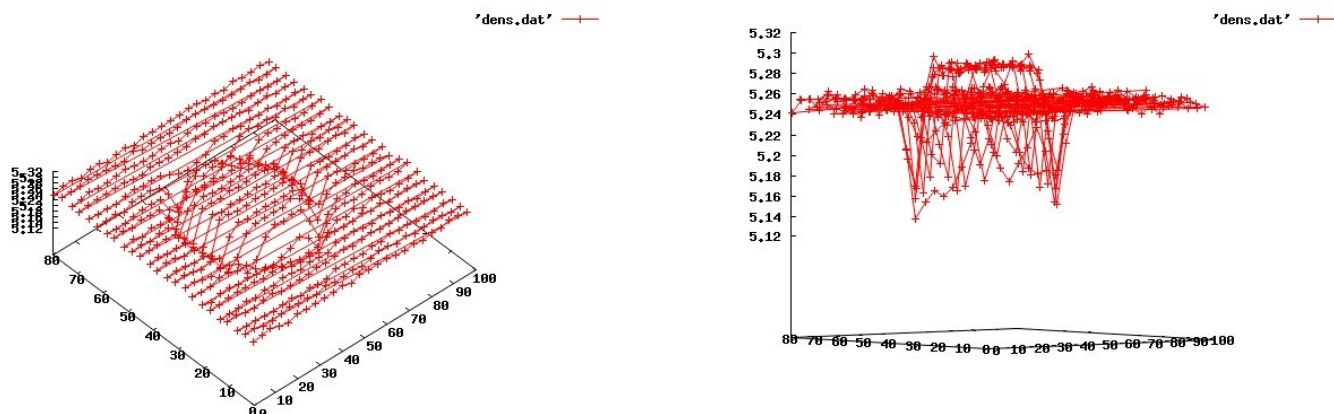


Figura 3.4 Simulação para obtenção da lei de Laplace. Rede de 64x64 sítios com uma densidade média de 4,9 partículas por sítio. Note o ruído na interface.

A Fig. 3.4 mostra a configuração típica da simulação sem fazer médias; note como a interface varia de forma. O ruído presente nos modelos de ACGR é claramente visível na interface. Por este motivo, bolhas pequenas têm um movimento aleatório e mudam de posição com certa facilidade, mesmo que o momento total no sistema seja nulo. A interface fica mais bem definida na Fig. 3.5.

Quantitativamente, obtém-se a equação de Laplace repetindo-se o procedimento para diferentes raios e fazendo o gráfico de $p_1 - p_2$ versus $1/R$. A inclinação nos dá uma estimativa da tensão superficial. A Fig. 3.6 mostra o resultado para densidade inicial de 4,9 partículas por sítio.

O gráfico de tensão superficial versus a densidade reduzida é mostrado na Fig. 3.7. Os quadrados indicam nossos resultados e os triângulos os obtidos em [37]. Uma possível explicação para a pequena diferença reside em como definir o raio, posto que a interface tem uma



(a) Vista inclinada. As partículas que estão dentro do círculo são azuis e as que estão fora são vermelhas.

(b) Vista de lado. A altura corresponde a densidade de partículas. Note a diferença de densidade dentro e fora da bolha e a diminuição dessa na interface.

Figura 3.5 Os gráficos mostram a densidade de partículas por sítios versus sua posição no plano. As duas figuras mostram o mesmo resultado, porém com ângulos diferentes. A parte central corresponde a bolha azul. A densidade média dentro da bolha é de 5,29 partículas por sítio, enquanto que fora, é de 5,25. Na interface, a densidade chega a cair até 5,14. A rede tem dimensões de $100 \times 100\sqrt{3}/2$ unidades de rede, e as médias foram obtidas com 5 mil passos.

espessura não nula.

Quando tentamos simular para densidades menores que 2,8 partículas por sítio, a bolha inicial se esfacelava e observávamos uma fase misturada estável. Estes valores concordam com o gráfico da Fig. 3.3.

Um estudo teórico analítico e numérico [37] sugere que a tensão superficial no modelo ILG é levemente anisotrópica, mas que este efeito desaparece na medida em que o raio cresce.

Os efeitos capilares também podem ser adicionados ao modelo [16]. Basta colocar partículas da cor molhante nos sítios marcados como obstáculos. Estas partículas não mudam de posição durante toda a simulação e influenciam o vetor gradiente de cor nos sítios vizinhos aos obstáculos. Segue que o fluido da cor molhante tende a ficar nos sítios próximos ao obstáculo. Este comportamento origina as forças capilares. A quantidade de partículas no obstáculo, junto com a densidade de partículas no fluido, determina o ângulo de contato. A Fig. 3.8 mostra

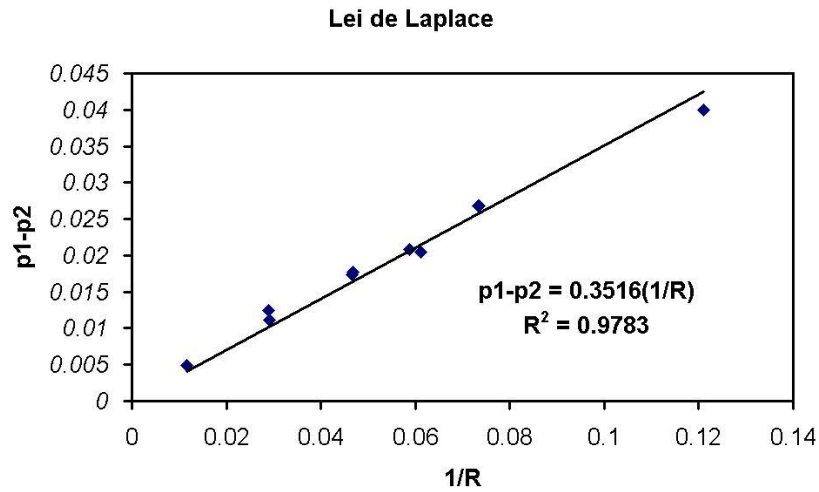


Figura 3.6 A verificação da lei de Laplace. Densidade inicial é de 4,9 partículas por sítio e raios variando de 40 a 400.

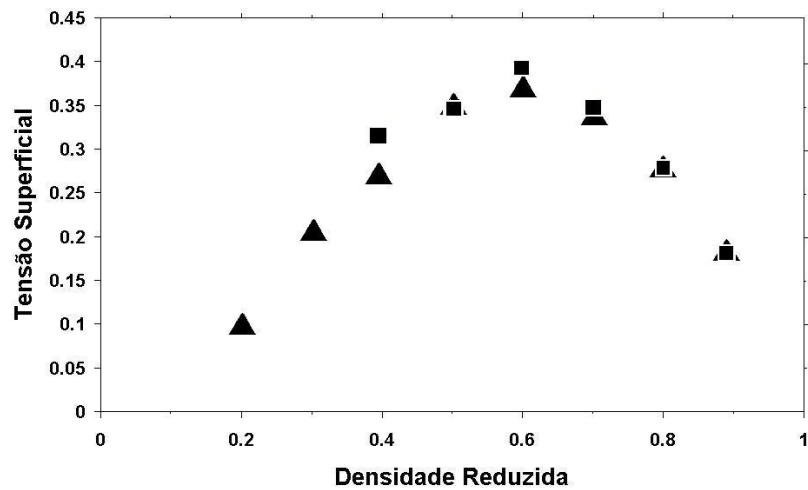
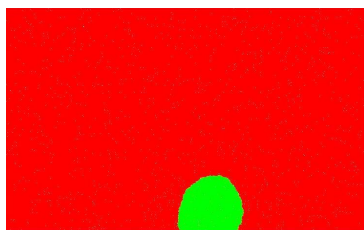
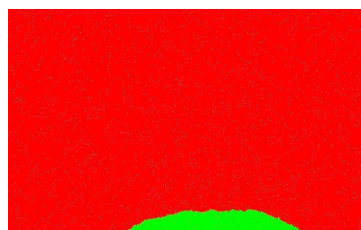


Figura 3.7 Gráfico das tensão superficial versus a densidade de partículas reduzidas (densidade por célula). Os quadrados são as estimativas que obtemos e os triângulos são as estimativas encontradas em [16]

o ângulo de contato para dois casos. A linha de baixo é preenchida com obstáculos contendo partículas de uma das cores. Inicialmente, as bolhas eram retangulares e no equilíbrio atingem o formato ilustrado.



(a) 1 partícula vermelha em cada obstáculo. Densidade de 3,85 partículas por sítio.



(b) 6 partículas verdes em cada obstáculo. Densidade de 3,5 partículas por sítio.

Figura 3.8 Simulação do fenômeno da molhabilidade (wettability). Na figura da esquerda o fluido molhante é o vermelho e na da direita é o verde. O sistema já se encontra em equilíbrio. Note a diferença do ângulo de contato.

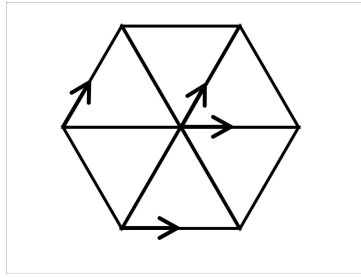
Apesar destes sucessos, há um efeito indesejado, porém contornável. A condição de contorno na interface exige que a componente da velocidade dos dois fluidos normais à superfície seja a velocidade da própria interface [16]. Isto implica que a correção feita na Eq. 2.7 não é possível (re-escalar a velocidade na equação macroscópica). Portanto, só se estabelece uma conexão concreta com escoamentos reais nas situações em que esta diferença seja desprezível, ou seja, para baixos números de Reynolds. Outra solução seria aumentar o número permitido de partículas paradas por sítio tal que a função $g(\rho)$ se aproximasse de 1 como descrito no Capítulo 2.

3.2 Modelos com Espalhadores para a Célula de Hele-Shaw

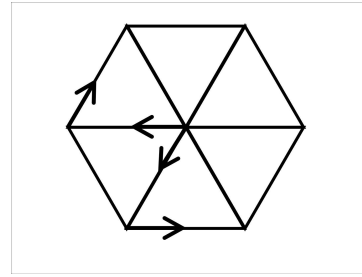
A equação que rege o escoamento numa célula de Hele-Shaw na aproximação discutida na introdução é diferente da equação de Navier-Stokes em sua versão bidimensional. Em consequência, o modelo discutido no Capítulo 2 não é adequado para simulação do mencionado

escoamento. No entanto, é possível fazer uma alteração para este fim [20].

A equação que rege a célula de Hele-Shaw é similar à lei de Darcy para meios porosos (veja as Eqs. (1.17) e (1.16)). Isto sugere que um ingrediente importante é a dissipação de momento. De fato, esta é a única modificação necessária e é obtida por meio da introdução de espalhadores. O espalhador age invertendo o momento das partículas de um sítio como mostrado na Fig. 3.9: uma partícula com velocidade c_i que chega ao sítio marcado como espalhador tem sua velocidade modificada para $-c_i$.



(a) Configuração inicial.



(b) configuração após a ação do espalhador.

Figura 3.9 O efeito do espalhador. Este atua invertendo as velocidades de cada partícula no sítio.

A densidade deve ser muito menor que a densidade de partículas de maneira que o livre caminho médio seja afetado minimamente. É também interessante que sua posição mude com o tempo. Uma maneira de se obter isto é associar uma taxa de aparecimento de espalhador por sítio. Assim, cada sítio tem uma probabilidade não nula de agir como espalhador num dado passo de tempo. Simulações mostraram que taxas menores que 0,01 são suficientes para diversas situações físicas de interesse.

Na realidade, a equação obtida por este procedimento é similar a de Navier-Stokes, acrescida de um termo de amortecimento. Considerando a situação estacionária e fazendo $g(\rho) = 0$ (para FHP-II e FHP-III $\rho = 3,5$) obtêm-se [20]

$$\alpha \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}_{\text{ext}}, \quad (3.8)$$

onde α é positivo e pode ser estimado através de simulações. Porém, na situação de baixas velocidades e de variações pequenas na derivada segunda da velocidade, temos exatamente a equação desejada [20]:

$$\mathbf{u} = -\frac{1}{\alpha\rho}\nabla p + \mathbf{F}_{\text{ext}}. \quad (3.9)$$

Uma análise teórica similar a do segundo Capítulo sugere a seguinte modificação no operador colisão [20]:

$$\Delta'_i = \Delta_i + N_s(N_{i+3} - N_i) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (3.10)$$

onde N_s é a taxa de aparecimento do espalhador e o sub-índice significa $i \bmod 6$. Considerando N_s pequeno, este novo termo é desprezado numa primeira abordagem e se chega à Eq. (2.7). Por outro lado, considerando-se o termo desprezado, e utilizando a expressão para a distribuição de equilíbrio (2.87), obtemos o termo $\alpha\mathbf{u}$ em (3.9).

Um teste quantitativo para a Eq. (3.8) é considerar as condições de contorno de Poiseuille. A solução para este escoamento é [20]:

$$u_x(y) = -\frac{1}{\alpha\rho}G \left[1 - \frac{\cosh[r(y - L/2)]}{\cosh(rL/2)} \right], \quad (3.11)$$

onde G é a força aplicada (mesma notação do Capítulo 2), $r = \sqrt{\alpha/\nu}$ e L é a largura do canal.

A simulação é feita em uma rede 32X32, com condição de contorno de não-deslizamento na primeira e última linha, condições de contorno periódicas nas laterais, densidade de 3,5 sítios por nó ($g(3,5) = 0$), taxa de espalhadores de 0,005 por sítio e taxa de força de 0,02 por sítio na direção horizontal, da esquerda para a direita. Deixamos o sistema chegar ao equilíbrio em 10 mil passos e fazemos uma média de 10 mil passos na velocidade (fizemos também médias de até um milhão de passos com resultados praticamente idênticos). Os triângulos da Fig. 3.10 são os resultados da simulação e a linha é um "fitting" de acordo com a função (3.11). Note

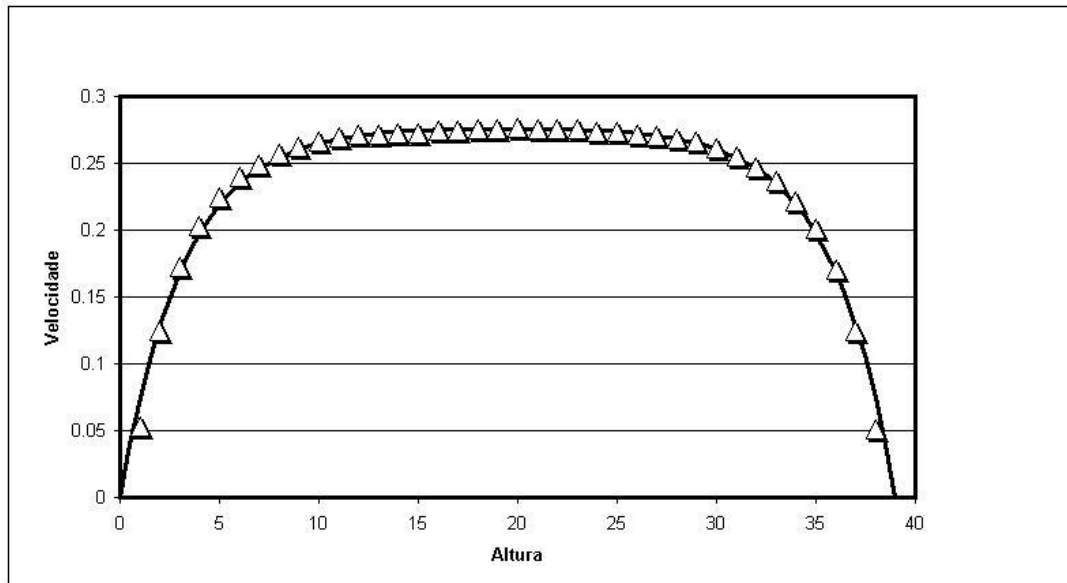


Figura 3.10 Perfil de velocidade para o escoamento similar ao de Poiseuille, porém realizado com o modelo de espalhadores. A taxa de espalhadores é de 0,005, com densidade de 3,5 partículas por sítios e taxa de força de 0,02. O fitting corresponde a Eq. (3.11)

a ótima concordância. Os dois pontos menos ajustados correspondem àqueles próximos dos obstáculos. Uma possível explicação é a camada de Knudsen que já apareceu na simulação do Capítulo 2, porém é necessária uma investigação mais profunda para assegurar tal afirmativa.

Para obter o coeficiente α utilizam-se simulações similares às descritas acima, porém sem obstáculos e com condições de contorno periódicas também na vertical. Por simetria, a derivada segunda no espaço é nula e (3.8) se transforma em (3.9). Por fim, a solução de (3.9) é uma velocidade constante. A implementação da simulação está em andamento e se cogita a possibilidade de que para taxas de forças suficientemente altas a solução se aproxime de um formato quadrático similar a lei de Forchheimer (lidaremos com a lei de Forchheimer em outro contexto no próximo Capítulo).

3.3 Célula de Hele-Shaw com Dois Fluidos Imiscíveis

Considere agora um modelo com cores e espalhadores. Não encontramos na literatura a junção destes dois modelos e acreditamos que os resultados obtidos sejam originais. Qualitativamente, estes concordam com experimentos.

Com este modelo é possível simular escoamentos de dois fluidos imiscíveis numa célula de Hele-Shaw. Na Ref. [38] há uma simulação com o modelo de espalhadores neste sentido, porém a interface é implementada de maneira completamente diferente. Esses escoamentos podem apresentar instabilidades na interface entre dois fluidos que ainda hoje é objeto de pesquisa: as famosas instabilidades de Saffman-Taylor [5]. A mais conhecida delas é a formação de um "dedo" dominante analisado pelo artigo [5]. Convencionou-se chamar de "dedos de Saffman-Taylor". No entanto estes autores não foram os primeiros a estudá-los. Homsy em um review de 1987[7], afirma que provavelmente o primeiro artigo publicado sobre estas instabilidades foi de Hill em 1952 [7]. Para soluções estacionárias do problema de Saffman-Taylor, veja [39] e para simulações deste fenômeno utilizando outro método, veja [40].

3.3.1 Observações Experimentais

O escoamento depende, dentre outros parâmetros, do valor da velocidade média do escoamento U [6] e pode ser dividido em três tipos de comportamentos. Para um fluido mais viscoso empurrando um menos viscoso, a interface se estabiliza formando aproximadamente uma linha reta. Na situação inversa (um fluido menos viscoso empurrando um mais viscoso), para U pequeno, acontece o mesmo. Este é o primeiro tipo de comportamento. O segundo tipo acontece para valores intermediários de U e está ilustrado nas Figs. 3.11. Neste caso, a interface inicial é instável, as pequenas flutuações formadas na interface passam por um processo de competição que termina com um único "dedo" sobrevivente. Por fim, para U grande, várias dinâmicas dependentes do tempo são observadas com formação de vários dedos em uma espécie

de "comportamento caótico". Os dedos bifurcam em alguns casos e um deste comportamento está ilustrado na Fig. 3.12. Um artigo mais recente [41] relata o caso de uma bolha formada a partir de um dos dedos seguida da agregação desta em um outro dedo (veja a Fig 3.13). Estudos sobre a formação do "dedo" de Saffman-Taylor em uma célula de Hele-Shaw com o *gap* variando encontra-se na Ref. [42].

É possível escrever uma equação para interface em um formato adimensional [8]. Vamos supor que a condição de contorno no infinito seja

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{|x| \rightarrow \infty} = -\frac{12\mu_{1,2}}{b^2} V_\infty - \rho_{1,2} g_{\text{eff}}, \quad (3.12)$$

onde $\rho_{1,2}$ é a densidade do fluido 1 e 2 respectivamente, g_{eff} é a aceleração de uma tipo gravidade, V_∞ é a velocidade no infinito e o resto dos parâmetros já foram definidos no Capítulo de Introdução. Neste caso, a dinâmica depende de três parâmetros adimensionais: a velocidade adimensional:

$$U_* = cV_\infty + g_{\text{eff}} \frac{b^2(\rho_2 - \rho_1)}{12(\mu_1 + \mu_2)}, \quad (3.13)$$

a tensão superficial adimensional:

$$B = \frac{\pi^2 b^2 \sigma}{3W^2(\mu_1 + \mu_2)U_*}, \quad (3.14)$$

e o contraste de viscosidade (ou razão de Atwood):

$$c = \frac{\mu_2 - \mu_1}{\mu_2 + \mu_1}, \quad (3.15)$$

onde, W é a largura da célula e o resto dos parâmetros já foram definidos.

Estas equações mostram que a variedade de comportamentos encontrados ocorre com a mudança de outros parâmetros. Esta observação é importante para as simulações, pois, além de nos fornecer uma interpretação para os resultados, permite-nos variar o parâmetro de modo

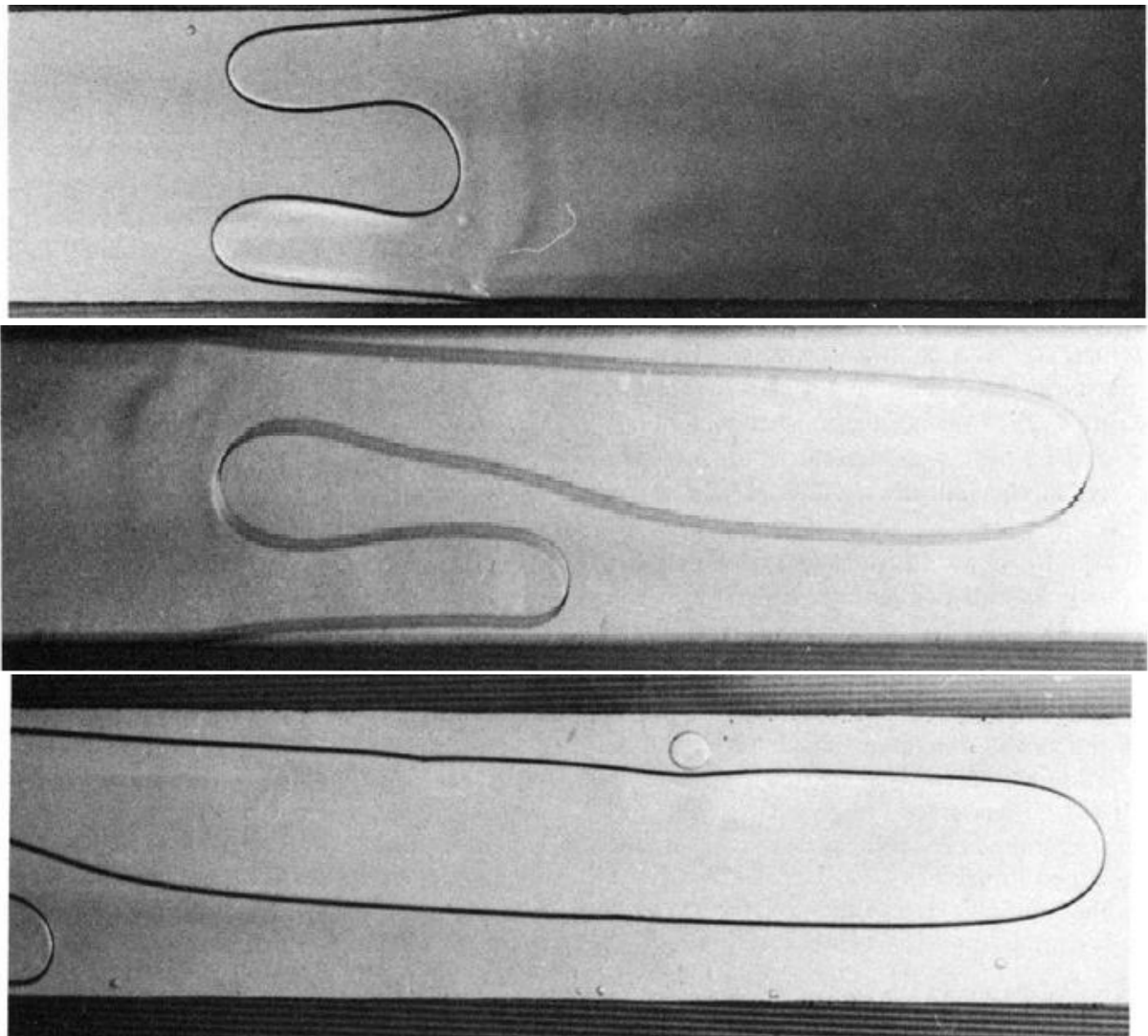


Figura 3.11 *Competição de duas protuberâncias conduzindo a emergência de um único dedo estável. As figuras são retiradas do mesmo experimento em tempos sucessivos [43].*

mais conveniente.

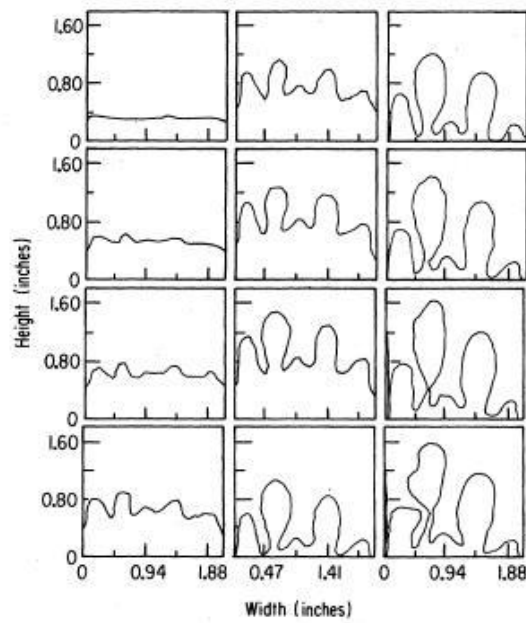


Figura 3.12 Série temporal para padrões de dedos com baixo contraste de viscosidade [44].

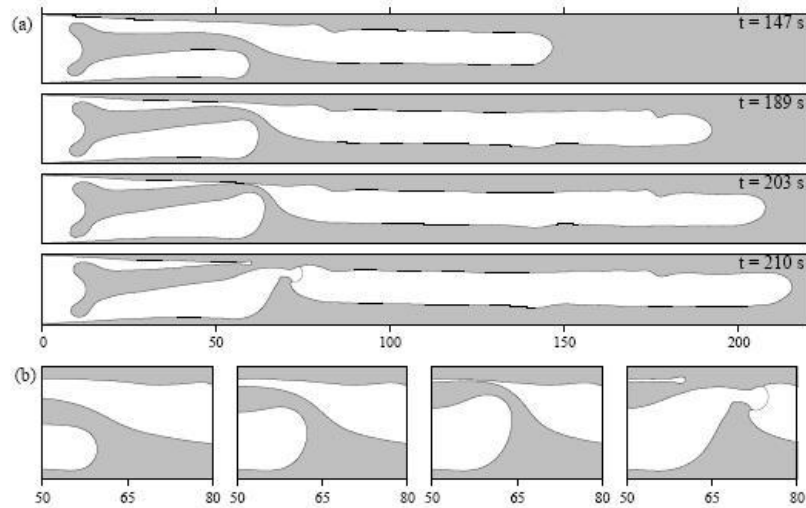


Figura 3.13 Sequência de um experimento em que ocorre uma formação de bolha, rapidamente seguida de uma agregação em outro dedo. O experimento não teve resolução temporal para ver a bolha separada [41].

3.3.2 Validação do Modelo ILG com Espalhadores

Como já discutido, para regiões onde há partículas de mesma cor, o comportamento é o mesmo de modelos em que não há cores (fluido único). Como a taxa de espalhadores deve ser pequena, espera-se que na interface o comportamento não sofra modificações relevantes. Mesmo assim, só foi permitido que os espalhadores agissem em sítios cujas partículas fossem da mesma cor. Porém, é possível que os espalhadores conduzam a um comportamento diferente na interface em relação ao modelo ILG.

No entanto, os resultados mostraram que a interface continua obedecendo à lei de Laplace e estimativas do valor da tensão superficial foram obtidas com as simulações de bolhas similares às já descritas. Descobrimos que a tensão superficial apresenta um pequeno aumento no seu valor, o qual depende da taxa de espalhadores. Este resultado ainda merece ser aprofundado e não descobrimos o mecanismo que provoca este efeito. A Fig. 3.14 mostra o resultado de uma das simulações. Além disto, concluímos que o esfacelamento da bolha, com a subsequente mistura das partículas de cores diferentes, ocorre para o mesmo valor aproximado, ou seja, para densidades menores que 2,8 partículas por sítio.

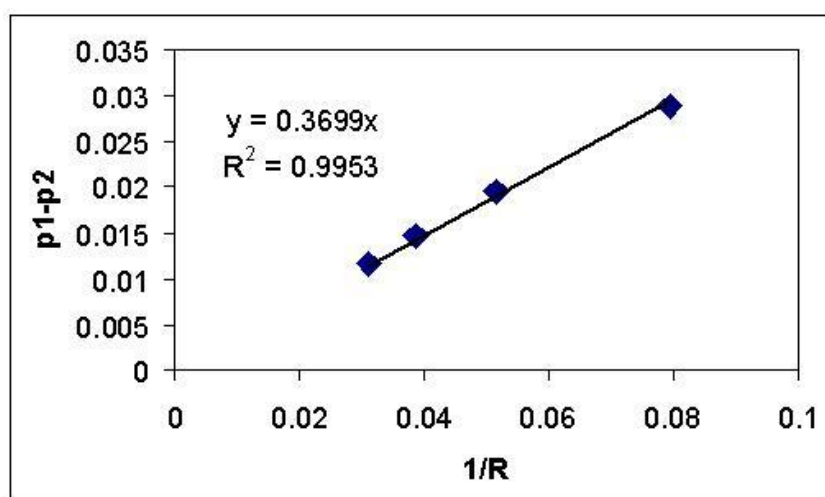


Figura 3.14 Verificação da lei de Laplace para o modelo de ILG com espalhadores. A densidade é de 4,9 partículas por sítio, a taxa de espalhadores é de 0,001.

3.3.3 Resultados das Simulações

As figuras abaixo mostram os resultados obtidos. As taxas de espalhadores são diferentes para cada fluido como uma forma de imitar a diferença de viscosidade entre os fluidos (identifique α da Eq. (3.9) com $12\mu/b^2$ da Eq. (1.17)). A Fig 3.15 ilustra a simulação de um fluido de viscosidade maior empurrando um de menor viscosidade. Em todas as simulações mostradas nas Figs. 3.16 - 3.20, o fluido vermelho tem uma taxa de espalhadores igual a 0,001 e o azul igual a 0,008, a densidade de partículas é de 3,5 partículas por sítio (valor que zera a função $g(\rho)$) e a taxa de força é de 0,0005 aplicada uniformemente em toda a rede na direção horizontal da esquerda para a direita, com exceção da figura 3.16 cuja taxa de força é de 0,0001. A linha mais alta e a mais baixa são preenchidas com obstáculo com condições de contorno de não deslizamento.

Para chegarmos aos vários comportamentos experimentais fizemos variar a largura W , com exceção da Fig. 3.16 a qual também variamos a força. Segundo a Eq. (3.14), a variação na largura W tem efeito similar a da variação da velocidade. Note a semelhança de comportamento das várias situações com o que é observado experimentalmente.

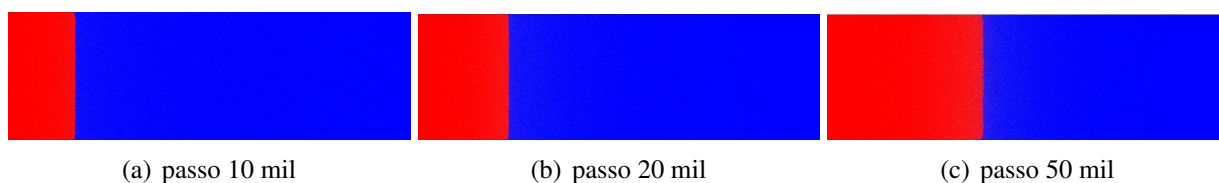


Figura 3.15 Simulação de um fluido mais viscoso empurrando um menos viscoso. A taxa de espalhadores é de 0,008 para o fluido vermelho e 0,001 para o azul. A velocidade é de 0,029

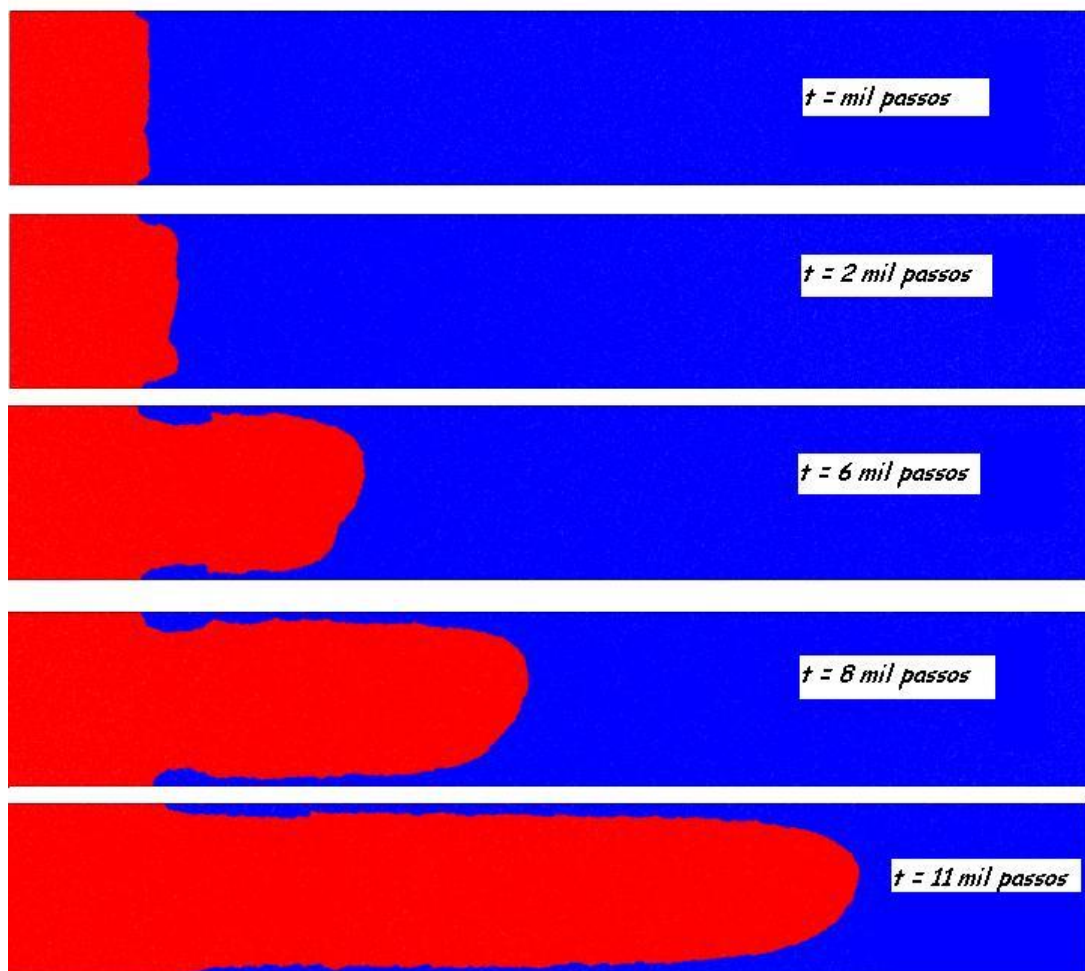


Figura 3.16 Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior. A rede tem dimensões de $3000 \times 500 \sqrt{3}/2$ unidades de rede. A taxa de força é de 0,0001.

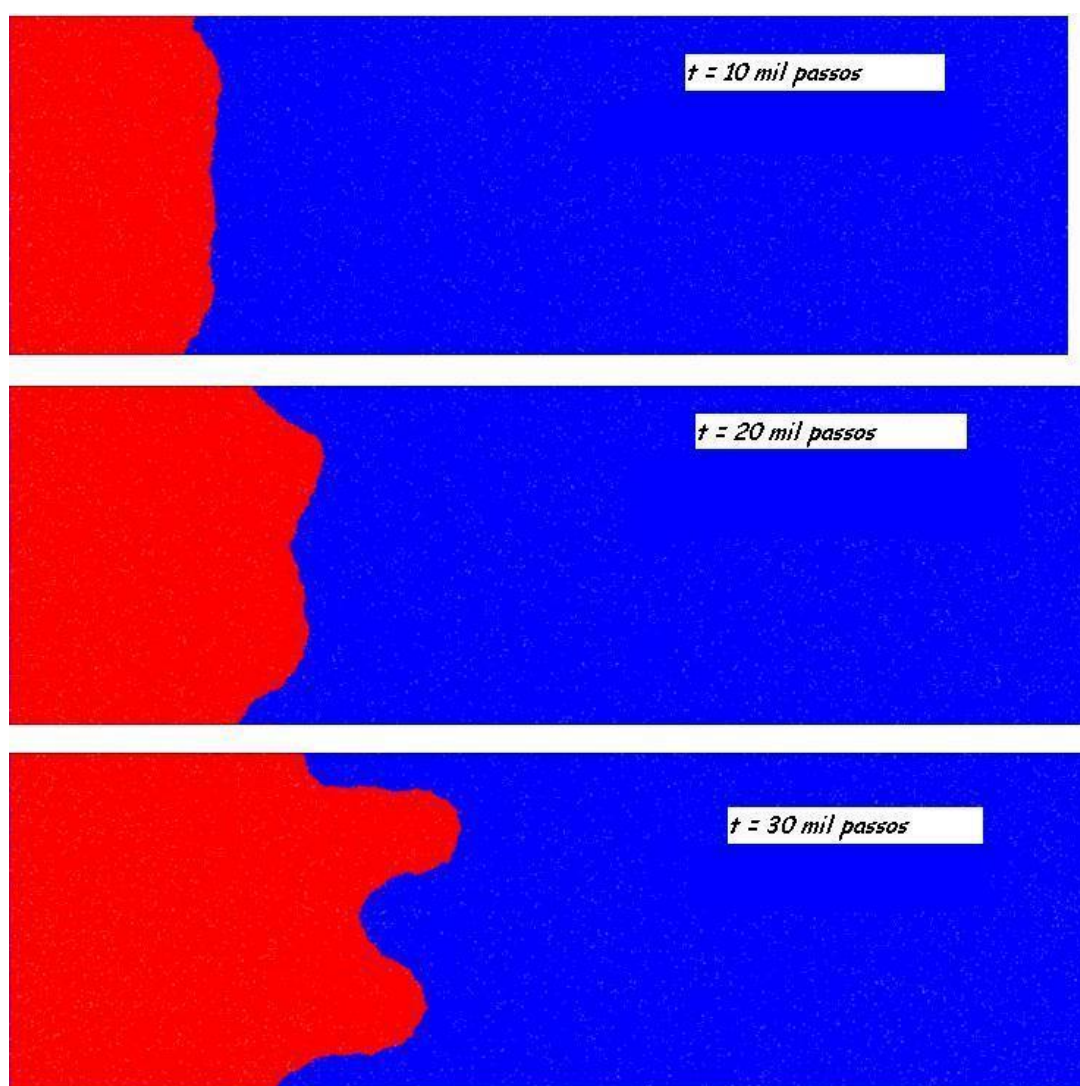


Figura 3.17 Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior. A rede tem dimensões de $3000 \times 500 \sqrt{3}/2$ unidades de rede. A taxa de força é de 0,0005.

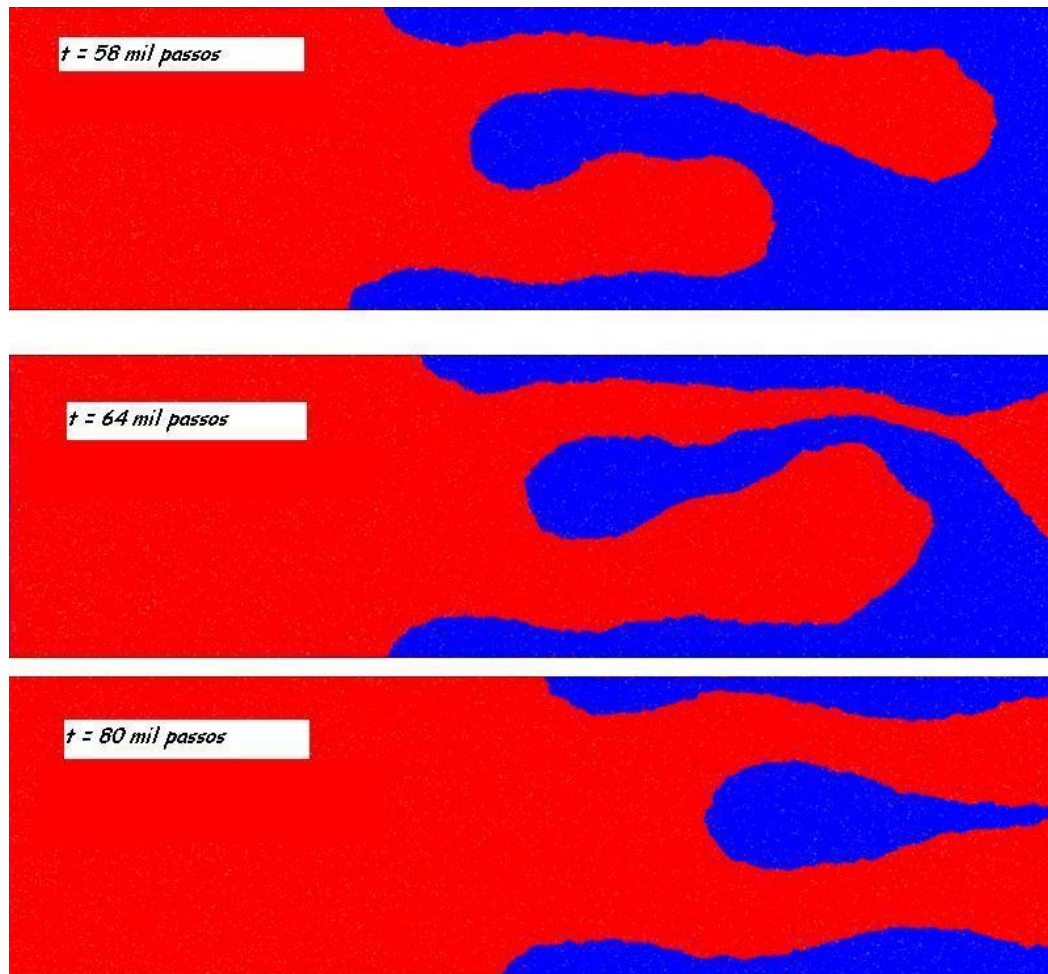


Figura 3.18 Continuação da simulação da figura anterior. Note as semelhanças com a Fig. 3.11.

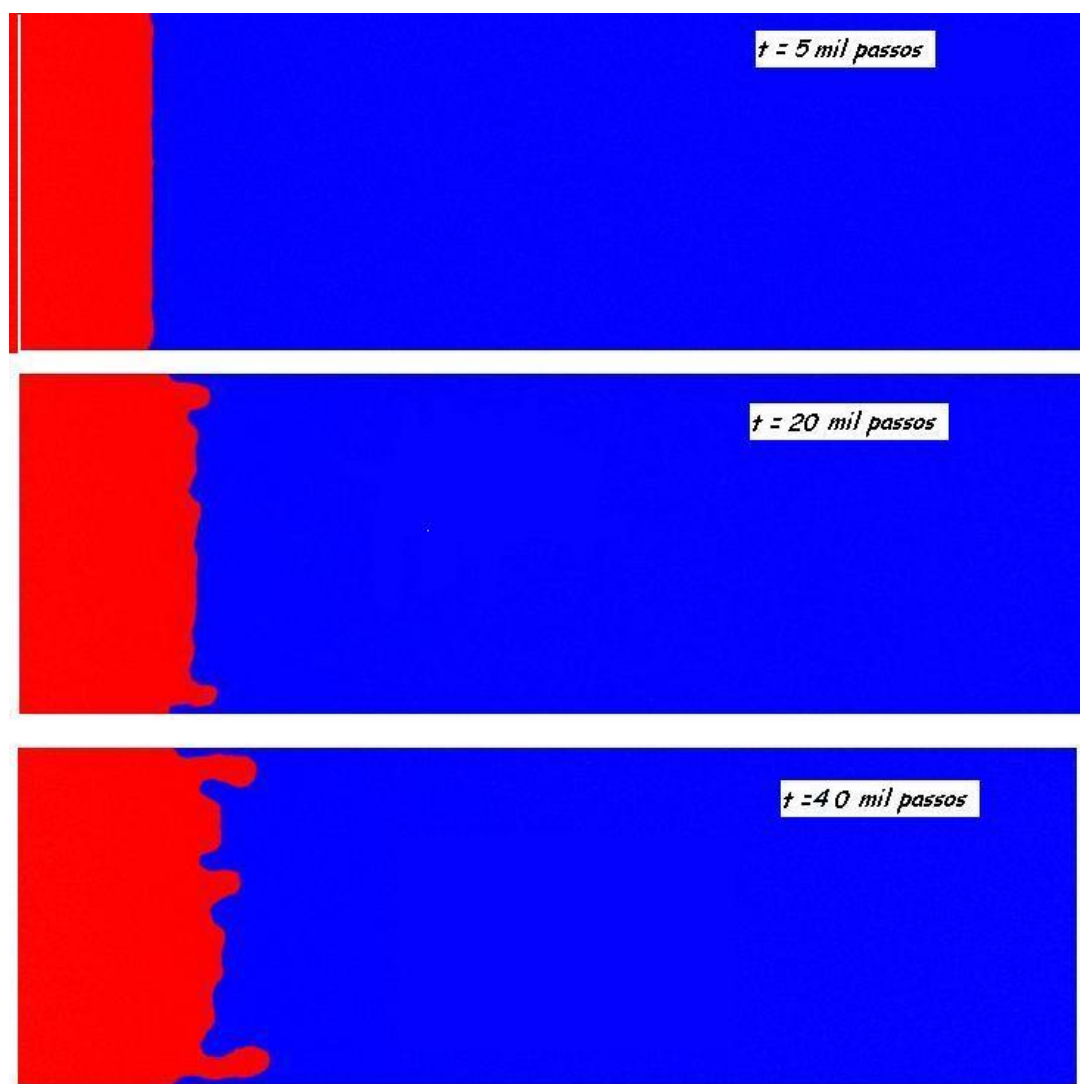


Figura 3.19 Simulação de um fluido de menor viscosidade empurrando um de maior para um valor pequeno de B . Rede com dimensões de $6000 \times 2000\sqrt{3}/2$ unidades de rede. A velocidade média é de 0,029

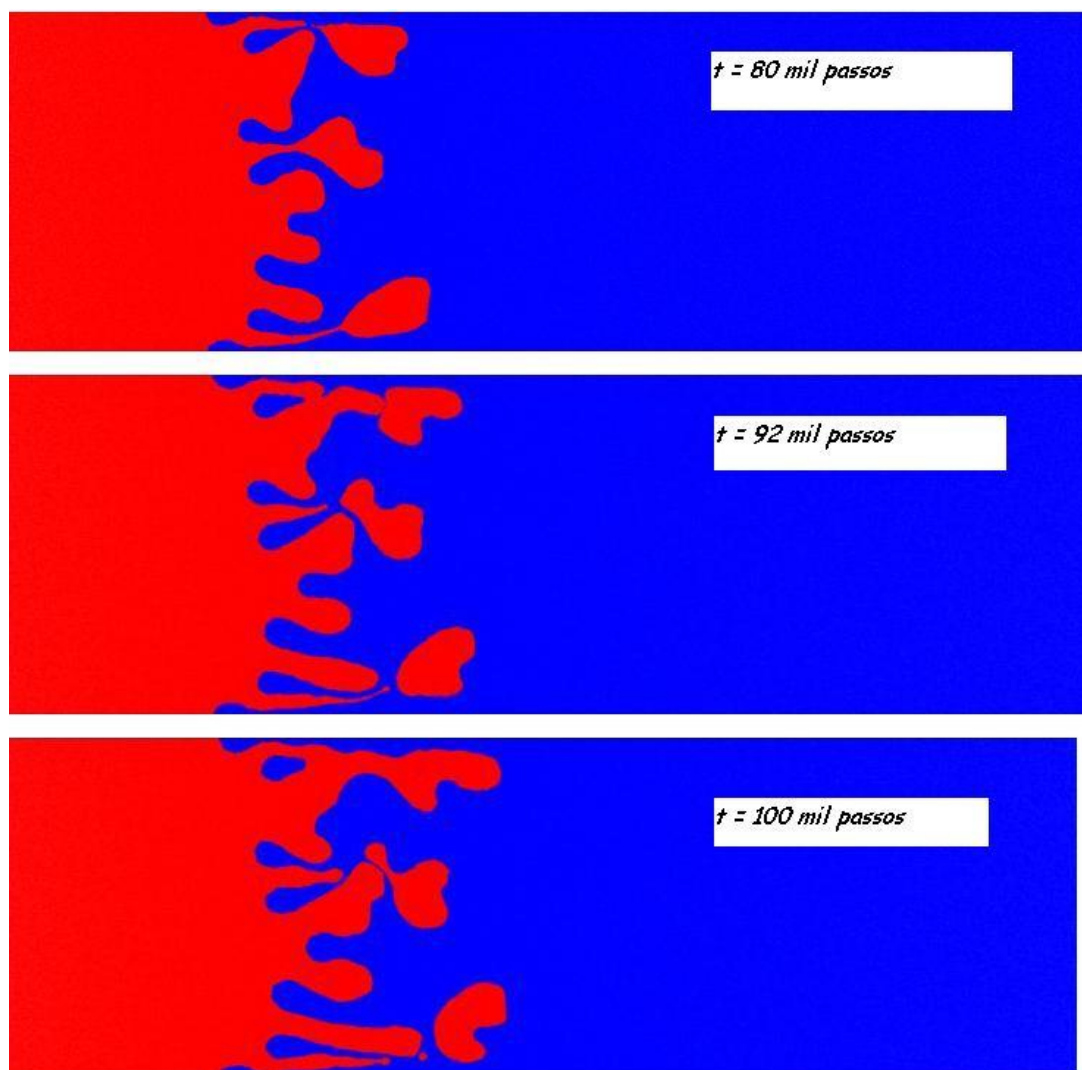


Figura 3.20 Continuação da simulação da figura anterior. Note a formação de bolhas e reagregação de algumas delas por outro dedo.

3.4 Modelo para o escoamento em Superfícies Cônicas

Não encontramos na literatura nenhum modelo de ACGR aplicado a superfícies curvas, a não ser o cilindro por meio das condições de contorno periódicas na horizontal ou na vertical (mas não em ambos). Quando a periodicidade acontece em ambas as direções, temos a topologia de um toro, porém não se pode dizer que temos uma superfície de um toro porque a curvatura gaussiana é diferente da superfície plana [45, 46].

O cone é uma superfície curva localmente isométrica ao plano [45] (exceto no vértice). A construção de um cone pode ser feito a partir de um pedaço triangular do plano colando duas de suas arestas. Nesta construção, uma geodésica que seja desenhada no plano (uma reta) continua sendo uma geodésica no cone por causa da isometria. Isto nos motiva a construir uma rede "triangular" no cone cujos arcos são geodésicas a partir de uma rede triangular regular no plano.

De maneira formal, seja uma rede triangular em um plano, dois nós A e A' desta rede e duas semi-retas r e s partindo de A e com direções coincidentes com as dos arcos como ilustrado na Fig. 3.21. Considere o subconjunto de nós compreendidos na região abaixo das semi-retas (região hachurada Fig. 3.21). Identifique os sítios da extrema direita com os da extrema esquerda numa mesma linha e curve o plano de maneira a formar um cone. Agora temos uma rede no cone cujos arcos são geodésicas de mesmo comprimento.

Esta construção sugere a implementação de um modelo de ACGR no cone. De fato, podemos definir o ACGR na rede inscrita no cone do mesmo modo que no plano. A propagação ocorre através dos arcos que coincidem com geodésicas e os vetores velocidade são transportados paralelamente através destes arcos. A colisão segue da maneira usual. Toda a discussão feita no Capítulo 2 é válida localmente, pois neste contexto o cone não difere de um plano. Um cuidado, porém, deve ser tomado próximo ao vértice do cone, pois neste local não há sítios suficientes para garantir que a distribuição seja aproximadamente a de equilíbrio. Para con-

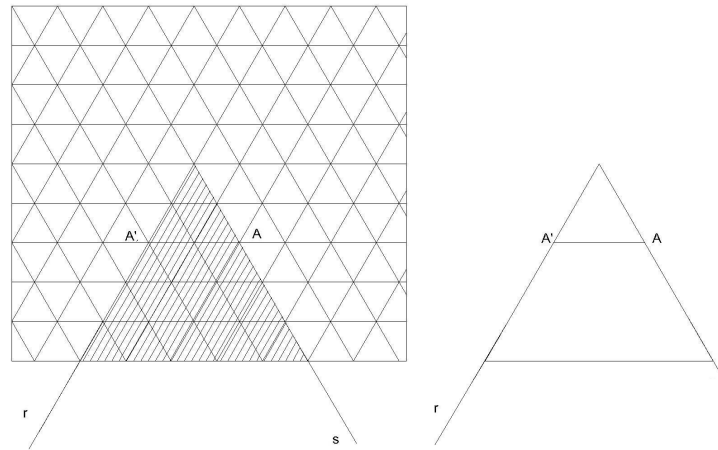


Figura 3.21 Construção de uma rede triangular inscrita no cone a partir de um plano: recorte a área hachurada da figura a esquerda e faça um cone colando os pontos da extremidade de uma mesma linha (por exemplo, cole A com A').

tornar este problema, basta considerar o escoamento longe o suficiente do vértice utilizando alguma condição de contorno conveniente. Deste modo, qualquer modelo definido no plano fica definido também no cone e é válido pelos mesmos argumentos.

É interessante notar a diferença da velocidade da partícula quando esta é representada em A ou em A'. O sítio A e A' é o mesmo quando formado o cone. Portanto, as partículas que estão no sítio A são as mesmas que estão no sítio A'. Porém, a direção da velocidade da mesma partícula quando vista em A não é o mesmo quando visto em A'. Este suposto efeito se deve ao transporte paralelo e desaparece quando vemos o cone e não sua representação no plano. Este fato nos permite implementar os escoamentos no cone modificando apenas as condições de contorno nos sítios adequados. Já implementamos o modelo para o cone junto com os modelos ILG com espalhadores, mas as simulações ainda estão em andamento.

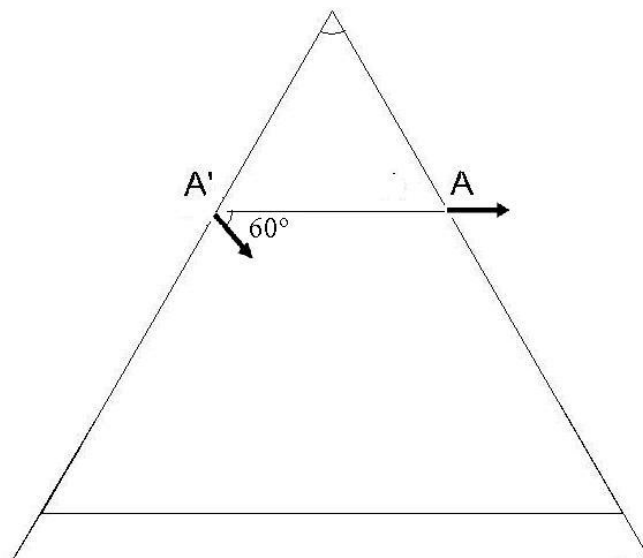


Figura 3.22 A diferença do vetor velocidade da mesma partícula quando esta é representada em A ou em A'. A diferença só existe porque estamos vendo uma representação do cone no plano e desaparece quando fazemos a construção descrita no texto.

CAPÍTULO 4

Fluidos em Meios Porosos e Dinâmica de Interfaces

Rugosas

As interfaces formadas entre dois fluidos em meios porosos podem apresentar propriedades fractais como a auto-afinidade ou a auto-similaridade. Nestes casos, é possível caracterizar expoentes associados a estas estruturas. Além disto, uma interface inicialmente lisa pode evoluir para uma rugosa com o comportamento dinâmico caracterizado pelas leis de escala apresentadas na Introdução.

Neste Capítulo apresentaremos os resultados e simulações através de modelos de ACGR de escoamentos de fluidos imiscíveis em uma célula de Hele-Shaw com desordem congelada cuja interface é, em princípio, caracterizada por leis de escalas da dinâmica da interface.

A primeira Seção aprofunda a dinâmica de interfaces rugosas e apresenta conceitos importantes no contexto da interpretação dos resultados. A segunda Seção discorre sobre os meios porosos de maneira geral. Nesta, apresentaremos os resultados de simulações similares aos já encontradas na literatura. E finalmente, na última Seção, apresentaremos o principal resultado deste Capítulo.

4.1 Dinâmica de Interfaces Rugosas

4.1.1 Auto-Afinidade

Um objeto é dito auto-similar quando este se parece o mesmo em todas as escalas [4, 47]. Não é necessário ser exatamente igual. Em particular, esta semelhança deve existir do ponto de vista estatístico. Um exemplo é o floco de neve de Koch ilustrado na Fig. 4.1. Um objeto é dito auto-afim quando, sob uma transformação de escala anisotrópica, este se parece o mesmo [4, 48]

Para quantificar superfícies rugosas é de interesse considerar funções auto-afins. Isto significa que

$$h(x) \sim b^{-\alpha} h(bx), \quad (4.1)$$

onde α é denominado o expoente de Hölder e nos fornece uma medida quantitativa da "rugosidade" da função [4]. Note que para α igual a um, a função h é auto-similar. Considerando um gráfico desta função, esta expressão significa que se modificarmos a variável x por $x' = bx$, ("esticarmos" o eixo horizontal de b), devemos modificar h por $hb^{-\alpha}$ ("esticar" o eixo vertical de $b^{-\alpha}$) para a função ficar parecida. Por exemplo, isto acontece no gráfico da posição de uma caminhada aleatória no tempo.

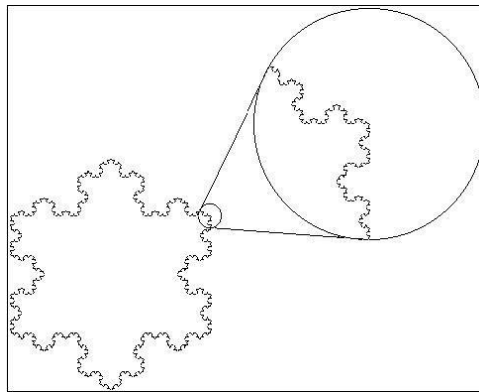


Figura 4.1 Floco de neve de Koch [49].

4.1.2 A Equação de Edward-Wilkinson

Seja uma superfície que obedeça às leis de escala descritas no Capítulo de Introdução e que esteja definida no tempo t pela função

$$h(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

A evolução desta interface pode ser descrita por uma equação com o seguinte formato geral:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Phi(\mathbf{x}, t, h). \quad (4.3)$$

Os casos de interesse têm em sua dinâmica uma contribuição estocástica. Esta pode ser expressa claramente na Eq. (4.3) como

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = G(h, \mathbf{x}, t, h) + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (4.4)$$

onde η é o termo de ruído aleatório. Em geral, a média é zero:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (4.5)$$

e o segundo momento vale:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta^d(t - t'), \quad (4.6)$$

onde d é a dimensão, e δ é a função delta de Dirac.

Uma maneira de especificar a (Eq. 4.4) é considerar cuidadosamente as simetrias obedecidas pelo sistema em questão e, em seguida, escolher a equação mais simples [4]. Mais simples aqui quer dizer manter apenas os termos de menor ordem. Este procedimento é justificado por argumentos de escala [4].

Nesta subseção iremos considerar sistemas cujas interfaces separam domínios em equilíbrio, ou seja, um domínio não cresce à custa do outro. Este é o caso de sistemas magnéticos (a interface formada por dois domínios com diferentes magnetizações) e fluidos imiscíveis [4].

As simetrias do sistema são [4]:

1. *Invariância sob translação temporal*

G não depende explicitamente de t . Por exemplo, não existem termos t^3 , pois uma translação de Δt faria com que G variasse para $(t + \Delta t)^3$. Note que $\partial h / \partial t$ não muda sob esta translação.

2. *Translação na direção de crescimento*

G não depende explicitamente de h . Então só há dependência com termos tipo $\nabla h, \nabla^2 h, \dots, \nabla^n h$. Por exemplo, ∇ não varia quando há uma translação de Δh ($\nabla h = \nabla(h + \Delta h)$)

3. *Translação na direção perpendicular ao crescimento*

G não depende explicitamente de $\mathbf{x}$.

4. *Inversão e rotação sobre a direção de crescimento*

G não depende de derivadas espaciais de ordem ímpar. Por exemplo, sob a transformação de $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$, $\partial h / \partial(-x) = -\partial h / \partial(x)$. Porém, $\partial^{2n} h / \partial(-x)^{2n} = \partial^{2n} h / \partial(x)^{2n}$, onde $n = 1, 2, 3, \dots$

5. *Simetria pela troca de cima/baixo*

G não depende de potências pares em h como, por exemplo, $(\nabla h)^2$ ou $(\nabla h)^4$. Para perceber porque isto ocorre, considere a equação $\partial h / \partial(x) = (\nabla h)^2$. Sob a transformação $h \rightarrow -h$, $\partial h / \partial(-x) = -\partial h / \partial(x)$ mas $(\nabla(-h))^2 = (\nabla h)^2$ e a equação se transforma para $\partial h / \partial(x) = -(\nabla h)^2$. Note que para $\nabla^2 h$ isto não ocorre.

Esta simetria está intimamente relacionada com a natureza de equilíbrio da interface. Em outras situações esta é quebrada.

Finalmente, acha-se para a Eq. (4.4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & a_{2,0}(\nabla^2 h) + a_{4,0}(\nabla^4 h) + \dots + a_{2n,0}(\nabla^{2n} h) + a_{2,2}(\nabla^2 h)(\nabla h)^2 + \\ & + \dots + a_{2k,2j}(\nabla^{2k})(\nabla)^{2j} + \eta(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde n, k, h são inteiros positivos e $a_{p,q}$ são os coeficientes dos termos.

Para os conceitos de escala, é interessante considerar o limite de t grande ($t \rightarrow \infty$) e grandes distancias ($x \rightarrow \infty$). Neste limite só se retêm os termos de mais baixa ordem, pois os outros não influenciam os expoentes de escala, como é confirmado pelo tratamento do grupo de renormalização [4]. Por exemplo, quando se faz a mudança de escala em $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' \equiv b\mathbf{x}$, a mudança em h deve ser de

$$h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h. \quad (4.8)$$

para manter as mesmas propriedades geométricas (lembramos que a superfície é auto-afim). Os termos $\nabla^2 h$ e $\nabla^4 h$ serão reescalados como

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h \equiv b^{\alpha-2} \nabla^2 h, \quad (4.9)$$

e

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h \equiv b^{\alpha-4} \nabla^4 h, \quad (4.10)$$

No limite em que $b \rightarrow \infty$, $\nabla^4 h \rightarrow 0$ mais rápido que $\nabla^2 h \rightarrow 0$. Sendo assim, aquele é desprezível quando comparado com $\nabla^2 h$.

O mesmo tipo de argumento implica que o termo $(\nabla^2)(\nabla)^2$ é o mais relevantes entre os $(\nabla^{2k})(\nabla)^{2j}$. No entanto, este termo é irrelevante quando comparado a $\nabla^2 h$.

Finalmente, chega-se a equação de Edwards-Wilkinson

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (\text{Equação de EW}) \quad (4.11)$$

onde v é às vezes chamado de "tensão superficial". O termo $v\nabla^2 h$ tem o efeito de suavizar a interface (deixá-la mais plana) redistribuindo o material de cada região.

Uma interface com velocidade diferente de zero pode ser descrita com a Eq. (4.11) adicionada de um termo v . No entanto, pode-se reobter a Eq. (4.11) quando considerado um sistema de coordenadas com velocidade v . Esta equação exibe o comportamento de escala discutido no Capítulo de introdução. Por causa do caráter linear da Eq. (4.11) é possível achar valores exatos dos expoentes. E, de fato [4]:

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4} \quad \text{e} \quad z = 2. \quad (4.12)$$

onde d é a dimensão da interface.

4.1.3 A Equação de Kardar-Parisi-Zhang

Até agora não mostramos nenhum exemplo de modelo. Neste contexto, é interessante discutir um pouco sobre um modelo discreto chamado de Deposição Balística (DB) [4] cuja rugosidade da interface obedece leis de escala. As propriedades da interface deste modelo começaram a chamar a atenção depois da introdução de técnicas de deposição por vapor [4]. Além disto, este modelo serve de motivação para introduzir outra conhecida equação de crescimento: a equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)[50].

Considere uma rede quadrada onde partículas são soltas em uma posição aleatória bem acima da superfície e segue uma trajetória vertical até grudar nesta. As partículas caem uma por vez e se agregam perpendicularmente ao primeiro sítio cujo vizinho pertence à interface. Este modelo está ilustrado na Fig. 4.2. O modelo pode ser estendido para dimensões maiores. Existem versões em que as partículas não ficam restritas a uma rede.

Estudos feitos através de simulações para $d = 1$ (a interface é uma linha) sugerem os se-

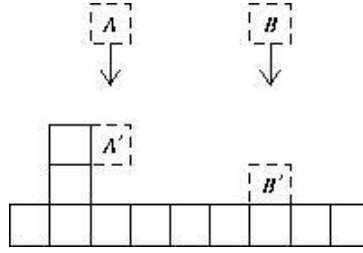


Figura 4.2 *Evolução do modelo de Deposição Balística*

guintes expoentes críticos [4]:

$$\alpha = 0,47 \pm 0,02; \quad \beta = 0,33 \pm 0,006. \quad (4.13)$$

Note a diferença em relação ao resultado da equação de EW, o que implica nova classe de universalidade. Uma das razões é que a DB não obedece à simetria da troca cima/baixo. O crescimento ocorre na direção normal local da interface e também há um crescimento lateral.

Este sistema obedece às simetrias 1 a 4 descritas acima, porém viola a quinta, o que permite a existência de termos como $(\nabla h)^{2n}$. A equação mais simples que satisfaz estas simetrias é a famosa equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [4, 50]:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (\text{Eq. de KPZ}) \quad (4.14)$$

A interpretação geométrica de $\frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2$ é a de "acrescentar" (ou retirar se $\lambda < 0$) material à (da) superfície [4].

É de interesse considerar a velocidade da interface. Considere h com condições de contorno periódicas, então:

$$v \equiv \int_0^L d^d \mathbf{x} \left\langle \frac{\partial h}{\partial t} \right\rangle, \quad (4.15)$$

onde L significa o tamanho da interface como no Capítulo de Introdução, $d^d \mathbf{x} \equiv dx_1 dx_2 \dots dx_d$,

e d é a dimensão do sistema. Para a equação de KPZ:

$$v = v \int_0^L d^d \mathbf{x} \langle \nabla^2 h \rangle + \frac{\lambda}{2} \int_0^L d^d \mathbf{x} \langle (\nabla h)^2 \rangle. \quad (4.16)$$

O termo de ruído tem média nula e por isto não aparece na expressão acima. O termo em comum com a equação de EW é zero também por causa da condição de contorno periódica (para perceber isto, use o teorema da divergência neste termo). Por fim, temos

$$v = \frac{\lambda}{2} \int_0^L d^d \mathbf{x} \langle (\nabla h)^2 \rangle. \quad (4.17)$$

Logo, a interface governada pela equação de KPZ tem velocidade não nula, mesmo quando não há forças atuando, exceto quando a interface é plana.

Resultados para interfaces unidimensionais são conhecidas através do procedimento de grupo de renormalização ou através do teorema de flutuação-dissipação [4]:

$$\alpha = \frac{1}{2}; \beta = \frac{1}{3}; z = \frac{3}{2}. \quad (4.18)$$

Note a concordância quando comparado com os resultados numéricos obtidos para a DB sugerindo uma mesma classe de universalidade.

Outro resultado estabelecido através do procedimento do grupo de renormalização para a equação de KPZ é a relação:

$$\alpha + z = 2. \quad (4.19)$$

válida para todas as dimensões.

4.1.4 Desordem Congelada

Diversos fenômenos envolvem interfaces em meios desordenados. Por exemplo, o escoamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso [4, 51, 9]. Neste caso, a desordem não varia com o tempo e, por isto, é denominada de "desordem congelada".

Nestes fenômenos, existe uma fase cuja interface permanece parada ou "presa" (*pinned*) enquanto a força aplicada F não supera um valor crítico F_c (estamos desconsiderando os efeitos das flutuações térmicas que ajudariam no movimento da interface). A velocidade é função linear da força F quando esta é muito maior que zero. Próximo à força crítica, há um comportamento de transição.

A equação de KPZ pode ser modificada um pouco para lidar com estes fenômenos. Basta incluir um termo de ruído que depende apenas da posição [4]. Além disto, no caso em que a temperatura é nula, retira-se o termo associado ao ruído temporal obtendo

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, h), \quad (4.20)$$

onde

$$\langle \eta(\mathbf{x}, h) \rangle = 0,$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, h) \eta(\mathbf{x}', h') \rangle = \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Delta(h - h'), \quad (4.21)$$

e Δ é uma função par, decrescente em seu argumento e que decai rapidamente para zero a uma distância finita a . Um exemplo para esta função seria a própria δ , implicando $a = 0$. Para adicionar ruído térmico, basta adicionar o termo de ruído de (4.14) na equação acima.

Estudos mostram que os expoentes da equação de KPZ podem variar com a natureza do ruído [8]. Por exemplo, se este for considerado distribuído com lei de potencia, ao invés de Gaussiano, um comportamento de escala diferente é observado [52].

A descrição exige a introdução de dois novos expoentes: o expoente da velocidade θ ,

$$v = f^\theta, \quad (4.22)$$

onde $f = (F - F_c)/F_c$ e v é o definido na Eq. (4.15); e o expoente do comprimento de correlação:

$$\xi \sim (F - F_c)^{-v} \quad (4.23)$$

onde ξ é o comprimento de correlação e consiste no tamanho característico das regiões "presas"[4].

Os dois novos expoentes estão relacionados com os restantes para a equação de KPZ [4] da seguinte maneira:

$$\theta = (z - \alpha)v. \quad (4.24)$$

4.2 Escoamento em Meios Porosos

Uma melhor compreensão do escoamento em meios porosos tem impacto em diversas áreas de pesquisa como já indicado na introdução [2, 1]. A estrutura do meio poroso é tópico de pesquisa por si mesma e em muitos casos é possível encontrar propriedades fractais como a auto-similaridade. Uma revisão sobre este tipo de descrição, junto com alguns aspectos topológicos e diversos tipos de escoamentos, pode ser encontrada na Ref. [2].

Uma equação importante para estes escoamentos é a lei de Darcy que foi enunciada na introdução como:

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu} \nabla p.$$

Esta é uma descrição macroscópica do escoamento em meios porosos. Porém, estamos mais interessados numa descrição mesoscópica (onde a geometria e a distribuição dos poros têm importância fundamental) e nas ligações que se estabelecem entre este dois níveis de descrição.

Nesta escala, escoamentos incompressíveis podem ser descritos pela equação de Navier-Stokes (1.1) [11].

A questão de como derivar a lei de Darcy em meios porosos a partir da equação não-linear de Navier-Stokes (1.1) foi tratada por vários autores através de métodos da mecânica estatística [1, 2], incluindo o cálculo da permeabilidade (no entanto, na maioria dos casos é necessário resolver equações intratáveis mesmo para modelos simples de meios porosos). Várias técnicas analíticas foram propostas para estimar k (permeabilidade) e algumas delas estão explicadas na Ref. [2]. Também se espera poder estimar k através de simulações do escoamento nesta escala [11, 12]. Outra questão é como os parâmetros e a lei se relacionam com a escala, pois é necessário saber como os resultados de experimentos na escala de centímetros se relacionam com escalas de quilômetros tão comuns nas aplicações.

Outro tópico fundamental é a difusão entre dois fluidos miscíveis em meios porosos. Há diversas aplicações em extração de petróleo, pois existem algumas técnicas que misturam alguns fluidos específicos com o petróleo no intuito de obter uma mistura mais fácil de extrair, ou no estudo da difusão em aquíferos de produtos químicos ou resíduos nucleares. Vários fatores complicam sua análise como a aparição de dedos viscosos [7].

Finalmente, de maior interesse para a presente dissertação é o caso de escoamentos de fluidos imiscíveis em meios porosos. As aplicações vão desde extração secundária de petróleo à engenharia civil, como explicitado no Capítulo de Introdução. A sua descrição é ainda mais complexa que no caso da difusão. Influenciam na sua dinâmica forças capilares, viscosas e gravitacionais. Na interface entre os fluidos atua a tensão superficial e a interação com as paredes dos poros faz surgir o fenômeno da molhabilidade (*wettability*). Em alguns casos aparecem bolhas que influenciam o escoamento.

Na indústria do petróleo, costuma-se chamar de embebição (*imbibition*) quando um fluido molhante invade um não molhante e de drenagem o caso oposto. O primeiro pode ocorrer por meio dos efeitos capilares [1] sem precisa de uma força atuando.

Apesar de não haver justificativas teóricas, é comum usar uma generalização para dois fluidos da lei de Darcy na forma:

$$\mathbf{J}_i = - \sum_j L_{ij}(S) X_j, \quad i, j = 1, 2 \quad (4.25)$$

onde J_i é a taxa de escoamento do fluido i , L_{ij} são os coeficientes de permeabilidade generalizada que dependem da saturação relativa S de um dos fluidos e X_j é a força aplicada ao fluido j [11, 12]. Note que a equação acima admite a possibilidade de que a força atuando em um fluido afete também o outro através dos "coeficientes de acoplamento" L_{12} e L_{21} . Pride e Flekkoy nas Refs. [53, 54] argumentam que $L_{12} = L_{21}$ como uma consequência da relação de reciprocidade de Onsager. Rothman [11, 12], através de simulações com um modelo ACGR tridimensional, mostra que L_{12} e L_{21} são diferentes de zero e confirma a reciprocidade de Onsager. Através desta simulação também afirma que o fluido molhante segue uma relação linear, mas que o não molhante segue uma relação não linear para forças pequenas. No entanto, quando a força aumenta a Eq. (4.25) se torna válida. Um aspecto interessante da simulação é a utilização da geometria de um meio poroso real obtido através de tomografia: a rocha de arenito (*sandstone*) de Fontainebleau. Para mais simulações com o método de *lattice-Boltzmann* ou modelos de ACGR, veja [16, 55].

Os modelos de ACGR e os métodos de *lattice-Boltzmann* são, talvez, as ferramentas computacionais mais apropriadas para lidar com estes tipos de escoamentos por causa da facilidade de incorporar a geometria complexa do meio poroso e as interações entre os diferentes fluidos. Na próxima Seção detalharemos alguns trabalhos junto com nossas simulações.

4.3 Simulações com os Modelos ACGR

Rothman provavelmente foi o primeiro a aplicar os modelos de ACGR ao escoamento em meios porosos [56]. Desde então diversos trabalhos foram realizados nesta linha de pesquisa. Nesta Seção, descreveremos como obter a permeabilidade de um meio poroso bidimensional através do modelo apresentado no Capítulo 2.

O modelo utilizado é o de 7 velocidades com colisões aleatórias. O meio poroso bidimensional é construído em uma rede triangular de tamanho 512 unidades de rede na horizontal e $512\sqrt{3}/2$ na vertical (ou 256X256 sítios) com obstáculos com a condição de contorno de não deslizamento. A densidade é de 4,9 partículas por sítio e utilizamos condições de contorno periódicas tanto na horizontal quanto na vertical. A força foi aplicada de maneira uniforme na horizontal, da esquerda para a direita a uma taxa que varia de 0,0001 a 0,00096. As distâncias entre os obstáculos não podem ser muito pequenas para não comprometer o limite de aplicabilidade do modelo. Para tanto, a rede foi dividida em 256 blocos de dimensões 32 por $32\sqrt{3}/2$ onde alguns foram escolhidos para serem obstáculos e o restante como espaço vazio. O arranjo dos blocos utilizados é o mesmo de [56]. A diferença da nossa simulação para a da Ref. [56] está no modelo utilizado (o artigo usa o FHP-I) e nos valores da taxa de força.

O escoamento é considerado estacionário depois de 10 mil passos e está ilustrado na Fig. 4.3. Os vetores foram obtidos através de médias espacial em regiões de 8X8 sítios e temporal do passo 10 mil a 15 mil. O fluxo é definido como a média da componente horizontal por toda a rede, vezes a porosidade:

$$q = \overline{u_x} \phi, \quad (4.26)$$

onde q é o fluxo, $\overline{u_x}$ é a média da componente horizontal da velocidade em toda rede e ϕ é a porosidade (espaço sem ser preenchido por obstáculos dividido pelo espaço total).

É esperado um certo desvio nos resultados em relação à Ref. [56] por causa da camada de Knudsen na interface dos obstáculos que dependem do livre caminho médio, pois esta quanti-

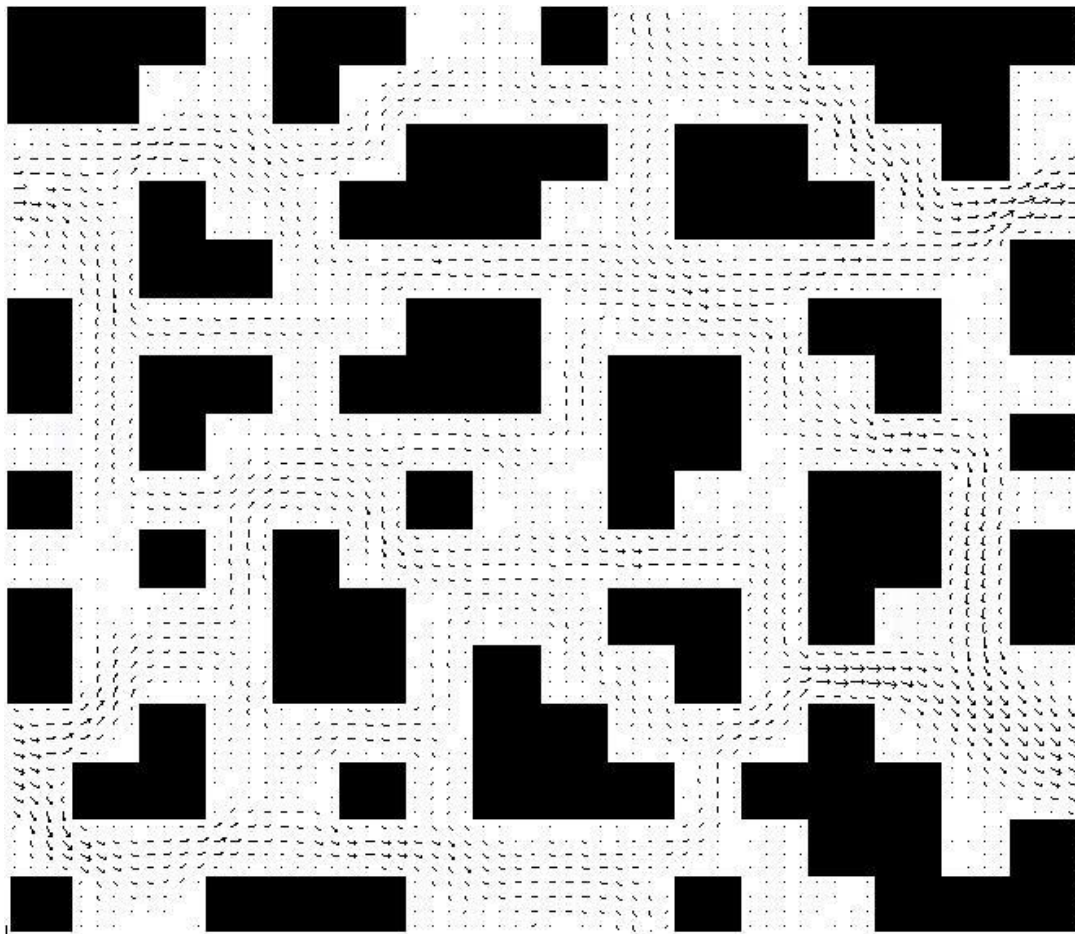


Figura 4.3 Escoamento em um meio poroso bidimensional simulado pelo modelo de 7 velocidades com colisão aleatória. Cada vetor é uma média espaço temporal de 8×8 sítios e 5 mil passos no regime estacionário. A taxa de força é de 0,0002

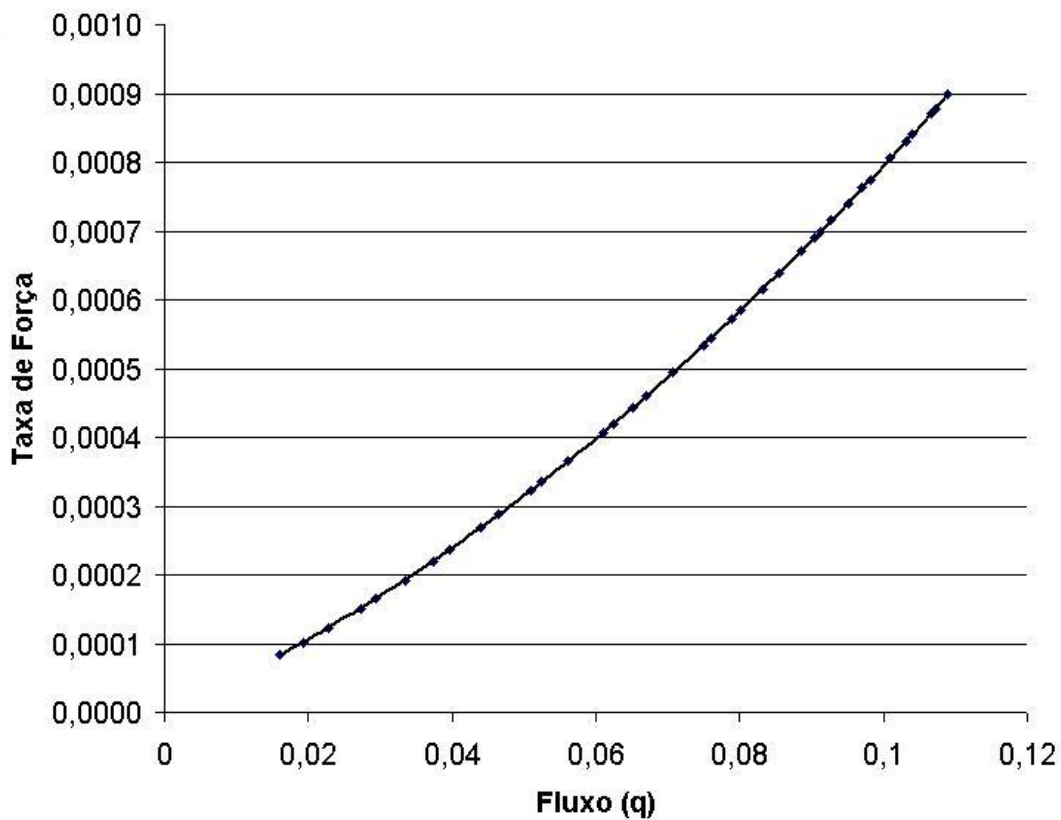


Figura 4.4 Gráfico da taxa de força versus a vazão. Note a adequação com o fitting de uma parábola (linha). Para taxas de força até 0,0004 o gráfico é aproximadamente linear e a lei de Darcy é válida. Para taxas maiores, é necessário fazer uma correção quadrática para esta lei conhecida como equação de Forchheimer.

dade é diferente para os modelos utilizados [35]. No entanto, nossas simulações vão mais além: à medida que a taxa de força aumenta, a lei de Darcy 1.17 deixa de ser válida e encontramos uma correção para ela conhecida como Eq. de Forchheimer [1, 57, 58]:

$$-\frac{dp}{dx} = \frac{\nu}{k}q + \rho\beta q^2, \quad (4.27)$$

onde $-\frac{dp}{dx}$ no nosso modelo é substituído pela taxa de força, k é a permeabilidade da lei de Darcy, ν é o coeficiente de viscosidade cinemática e β é um coeficiente do escoamento que depende do meio poroso (não confundir com o expoente crítico ligado ao crescimento de interfaces).

Este resultado já havia sido obtida antes com o ACGR para meios porosos bidimensionais [57], porém com outro tipo de obstáculo. A Fig. 4.4 mostra a dependência da taxa de força e vazão q . Através desta é possível estimar os coeficientes da Eq. 4.27. O número de Reynolds na simulação varia de 2,67 a 13,72 e é definido como em [58]:

$$Re \equiv \frac{Vd_p}{\nu}, \quad (4.28)$$

onde d_p é o diâmetro do obstáculo e V é a velocidade, a qual consideraremos como sendo a vazão.

4.4 Simulação de Fluidos Imiscíveis em uma Célula de H-S com Desordem

O estudo de padrões formados pela invasão de fluidos em meios porosos é de interesse fundamental no entendimento dos estados de não-equilíbrio na física, constituindo um paradigma no contexto da dinâmica de interfaces em meios desordenados [4, 59, 60, 48], além de ter profundo

impacto em diversas aplicações de interesse tecnológico. De acordo com a variação da velocidade, viscosidade e geometria do poro o padrão formado pode variar de compacto a dendrítico [61, 62, 63], passando por estruturas auto-similares e auto-afins (fractais). Leis de escalas podem ser observadas em diversos contextos como, por exemplo, na dinâmica da rugosidade ou dependência desta com o número capilar [64, 61, 65, 66, 62]. Outros estudos levam em conta os mecanismos de estabilização [64, 67] ou flutuações na velocidade [51].

O número capilar C_a é um importante parâmetro de controle e informa, essencialmente, a razão entre forças viscosas e forças capilares, no entanto, há diversas definições na literatura. Por exemplo, na Ref. [68] $C_a = \mu V / \sigma$ enquanto que na Ref. [63] defini-se o número capilar modificado $C_a = \mu V b^2 / k \sigma$, onde μ é a viscosidade dinâmica, V é a velocidade da interface, σ é a tensão superficial, b é o tamanho médio dos obstáculos e k é a permeabilidade. Quando C_a é pequeno, as forças capilares dominam e o padrão da interface depende do ângulo de contato, ou seja, da molhabilidade relativa [69]. Caso contrário, as forças viscosas dominam.

Vários experimentos usam a célula de Hele-Shaw com algum tipo de desordem como, por exemplo, a variação espacial do *gap* b [9]. Outros usam obstáculos circulares espalhados aleatoriamente [63, 8, 70]. A interface formada em ambos os casos podem obedecer às leis de escalas como descritas no Capítulo de Introdução, porém seus expoentes costumam ser diferentes [68, 9].

Em diversas situações, a interface é auto-afim, o que sugere um estudo no contexto de crescimento de interfaces. Há controvérsias sobre a validade da equação de KPZ no contexto da descrição do comportamento de escala. O expoente de rugosidade α varia dependendo das condições do experimento. Nas Refs. [63, 8] observa-se uma dependência de escala do expoente de rugosidade α com o número capilar C_a . Por outro lado, estudos sobre o formato da distribuição do termo de ruído na equação de KPZ [8] mostraram que os valores de α podem variar entre 0,5-1,0 dependendo de seu formato, o que concorda com os valores estimados em [63, 8]. Contudo, simplesmente escolher as características do ruído não explica satisfatoriamente a

dependência observada de α com C_a [8]. Argumenta-se na Ref. [65] que o enrugamento é resultado de uma força capilar local e aleatória e uma força viscosa não local e, portanto, a equação KPZ não poderia prever os expoentes de maneira confiável por causa de seu caráter puramente local.

Como já dito, estima-se que os valores experimentais de fato α se encontram no intervalo de 0,5 a 1. Além disto, α cresce à medida que C_a decresce. Isto implica que os efeitos dos poros no escoamento se tornam menos significativos à medida que a velocidade do escoamento aumenta. Afirma-se na Ref [71] que no limite de número capilar muito grande α é igual a 0,5 e que para $C_a \rightarrow 0$, $\alpha = 1$. No entanto, na Ref. [65] se argumenta que estes limites nunca se concretizam, sendo um dos motivos o caráter não local do fenômeno.

Quando C_a é grande, os efeitos viscosos podem introduzir valores máximos para w (isto é, w_{sat}) [63]. Rubio *et al.* [63] estima que o valor de corte é de aproximadamente dez vezes o tamanho do obstáculo quando o valor de C_a é da ordem de 10^{-2} (neste artigo utiliza-se uma célula de Hele-Shaw com obstáculos circulares e $C_a \equiv \mu V b^2 / k \sigma$).

Em resumo, experimentalmente temos que: α cresce à medida que C_a decresce com lei de potência e seus valores se encontram no intervalo de 0,5 a 1. Além disto, existe um valor de corte para w_{sat} quando C_a é muito grande, ou seja, w_{sat} atinge seu máximo e não o ultrapassa independente do tamanho do sistema.

4.4.1 Resultados das Simulações

Neste trabalho, simulamos o escoamento de fluidos imiscíveis em uma célula de Hele-Shaw com obstáculos circulares. Utilizamos o modelo ILG com espalhadores e colocamos obstáculos circulares, com raio variável, em locais aleatórios na rede. Acreditamos que simular as situações descritas acima com este modelo seja original.

Os obstáculos têm raios variando de 20 a 40 unidades de rede escolhidos aleatoriamente com uma distribuição de probabilidades uniforme. A densidade é de 3,5 partículas por sítio e

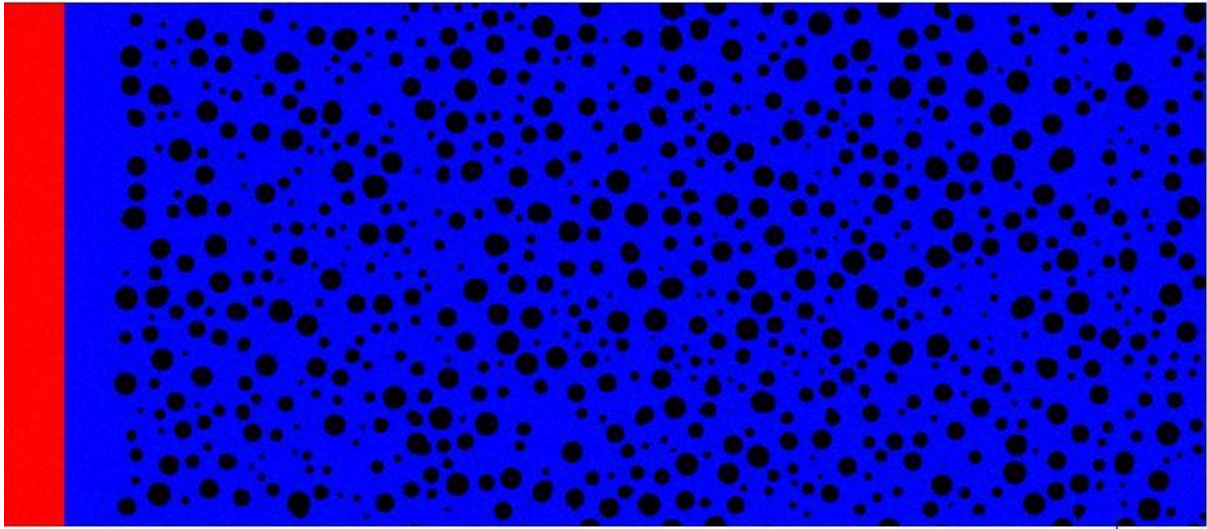


Figura 4.5 *Configuração inicial típica. Esta rede em particular possui dimensões de 5000 X 2500 sítios.*

a condição de contorno no obstáculo é a de não deslizamento (velocidade nula na parede do obstáculo). A força age uniformemente, na horizontal, da esquerda para a direita independente da cor das partículas e atua com taxas variando de 0,0002 a 0,0003. É aplicada a condição de contorno periódica na horizontal com uma diferença: as partículas que passam de uma extremidade a outra podem mudar de cor de modo que só existam partículas vermelhas na coluna da extremidade esquerda e só existam partículas azuis na extremidade direita, do mesmo modo que na Ref. [16]. Esta condição de contorno simula a injeção do fluido da cor vermelha. A primeira e a última linha são preenchidas com obstáculos de maneira a formar uma parede sólida. Inicialmente, o momento em toda rede é aproximadamente nulo. A diferença de viscosidade entre os fluidos é implementada pela diferença na taxa de espalhadores para cada cor como no Capítulo 3. Uma configuração inicial típica é ilustrada na Fig. 4.5. Na maior parte das simulações, a rede tem dimensões de 5000 X 2500 sítios e o tempo total é de 400 mil passos.

A interface se encontra inicialmente fora da região onde há obstáculos e é uma linha reta. Para tempos pequenos, esta se enrugam um pouco como se esperaria dos modelos de ILG [72]. No entanto, à medida que avança, a rugosidade aumenta mesmo antes de encontrar os obstáculos. Quando encontra os primeiros obstáculos, a rugosidade cresce rapidamente até ultrapassá-

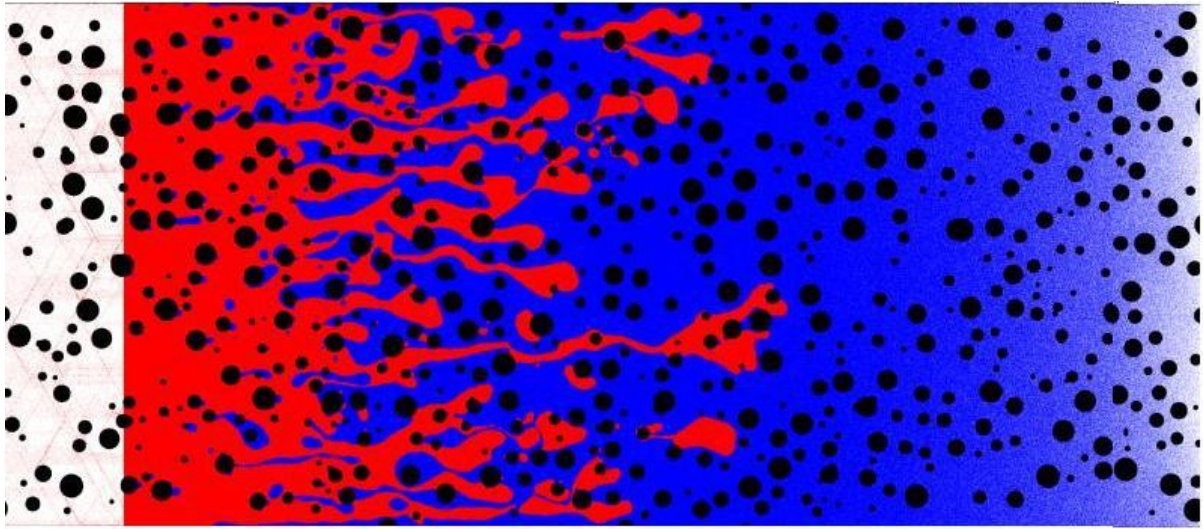


Figura 4.6 Formação de estruturas dendríticas quando um fluido menos viscoso invade um de maior viscosidade. A dimensão da rede é de 5000 X 2500 sítios. A força é apenas aplicada em uma faixa na região da esquerda. Nas regiões esbranquiçadas a simulação não é válida por causa da rápida variação na densidade e de seu baixo valor (os fluidos se tornam miscíveis nestas regiões).

los. Daqui em diante, sua dinâmica depende das características dos fluidos.

Nas nossas simulações, a molhabilidade relativa influencia pouco, ou nada, o comportamento da interface. Quando um fluido menos viscoso invade o mais viscoso, forma-se um padrão cheio de "dedos" como na Fig. 4.6. Na situação inversa, a interface atinge uma estrutura compacta cuja rugosidade é da ordem do raio dos obstáculos; quando o fluido molhante é o invasor, a interface se aproxima ainda mais de uma linha reta. A fig. 4.7 ilustra esta situação. Nestas simulações, a taxa de espalhadores é de 0,008 e de 0,001 partículas espalhadas por sítio em cada passo de tempo para o fluido de maior e menor viscosidade, respectivamente. Estes resultados estão de acordo com o que se esperaria depois das simulações discutidas no Capítulo 3 (instabilidade de Saffman-Taylor).

O resultado mais interessante é para o caso de fluidos com a mesma viscosidade. Esta situação é explorada experimentalmente na Ref. [68]. Na nossa simulação, a interface não é compacta e sua rugosidade satura para um valor maior do que o tamanho dos obstáculos. A taxa de espalhadores é de 0,008 para as duas cores. O crescimento da rugosidade obedece à

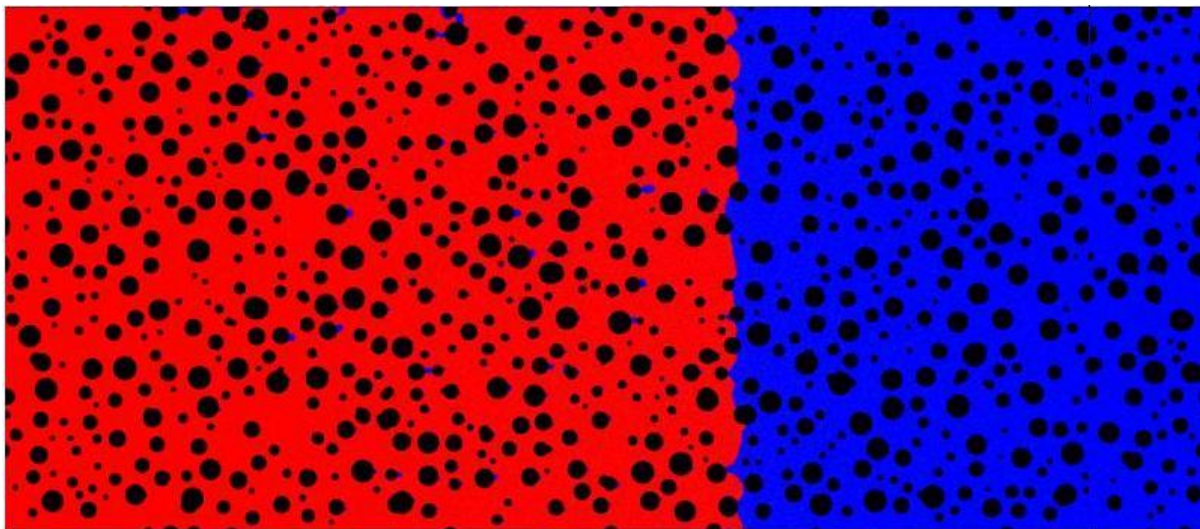


Figura 4.7 Invasão de um fluido mais viscoso em um de menor viscosidade. As forças viscosas dominam as forças capilares. Note como a interface tende a se estabilizar. A rugosidade é da ordem da dimensão dos obstáculos. A dimensão desta rede é de 5000 X 2500 sítios e a taxa de força aplicada é de 0,0003.

lei de escala depois de um transiente. Fizemos simulações para diferentes tamanhos de rede: $5000 \times \sqrt{3}/2(4000, 2500, 1500)$ em unidades de rede, o que exige a correção de $\sqrt{3}/2$ para a largura da célula de Hele-Shaw. Na Fig. 4.9 apresentamos os resultados de $w(t)$ para as três simulações mencionadas acima, obtendo gráficos coincidentes como em um "colapso" sem a necessidade do procedimento descrito no Capítulo de Introdução. Para corroborar este fato, acompanhamos para a simulação de largura total $L = (\sqrt{3}/2)4000$ a evolução de w_l em janelas na região central de tamanhos: $\sqrt{3}/2(100, 200, 400, 600, 800, 1600, 3200)$. Ou seja, observamos a interface apenas nos sítios que estivessem entre as linhas centrais, desconsiderando as restantes. Por exemplo, no caso da janela de do tamanho $100\sqrt{3}/2$, apenas consideramos os sítios que estavam entre as linhas 1950 e 2050, calculando o valor de w apenas nesta região. Na Fig. 4.10 está ilustrado cinco dessas janelas de tamanhos $\sqrt{3}/2(400, 800, 160, 3200$ e $3200)$. Observamos que apenas para janelas de tamanhos menores que $(\sqrt{3}/2)800$ há desvios em relação ao comportamento observado para a largura total.

Estimamos para o expoente de crescimento β valores entre 0,6 e 0,8 dependendo de quais pontos consideramos. Estes valores concordam com os dados experimentais [4, 68]. Para a

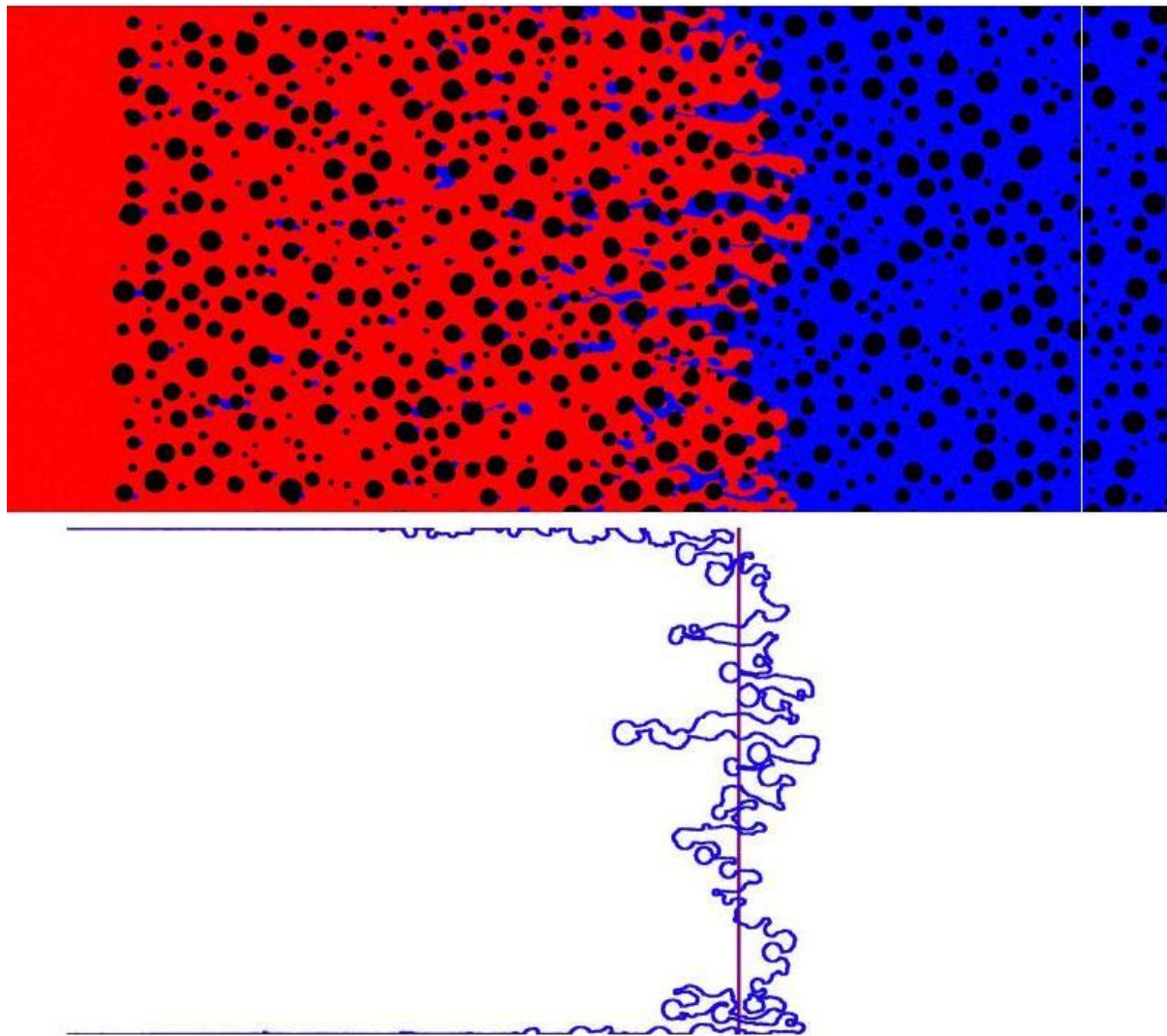


Figura 4.8 Simulação de uma fluido invasor de mesma viscosidade para a rugosidade saturada. Esta rugosidade é maior do que a dimensão típica dos obstáculos. A rede possui dimensões de 5000 X 2500 sítios e a taxa de força é de 0,0003. Abaixo é aplicado o algoritmo que determina a localização da interface.

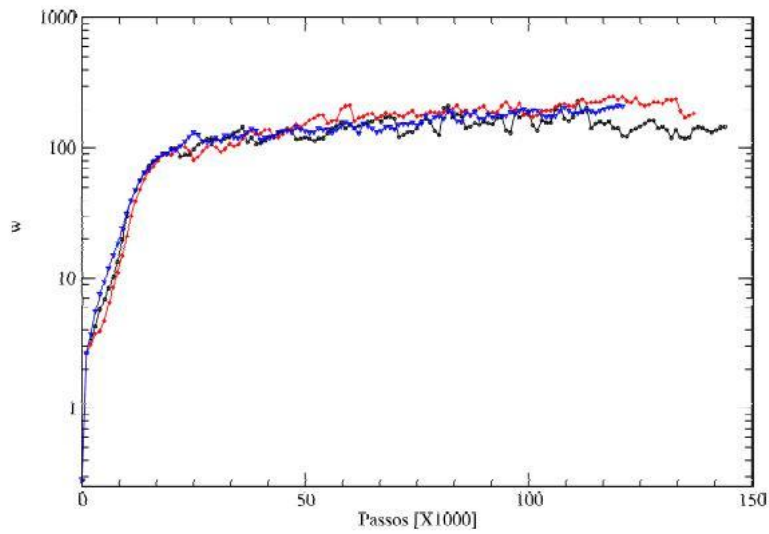


Figura 4.9 Dependência de w com o tempo para simulações de larguras $\sqrt{3}/2(1500, 2500, 4000)$ (vermelho, preto e azul respectivamente). Cada ponto do gráfico é está separado do seu vizinhos em 1000 passos de tempo. Note que as três simulações têm o mesmo w_{sat}

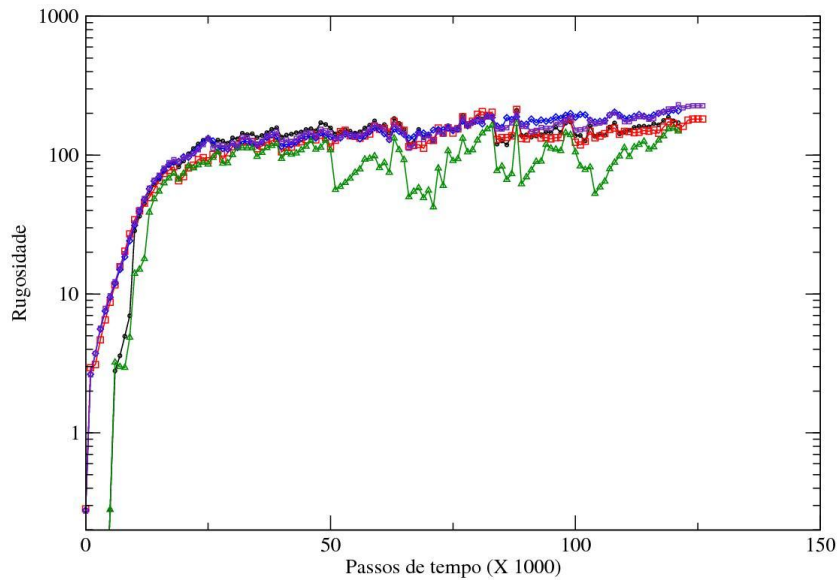


Figura 4.10 Dependência de $w_l(t)$ com o tempo para as janelas de tamanhos: $(\sqrt{3}/2)400$ (verde), $(\sqrt{3}/2)800$ (vermelho), $(\sqrt{3}/2)1600$ (preto), $(\sqrt{3}/2)3200$ (lilás) e $(\sqrt{3}/2)4000$ (azul).

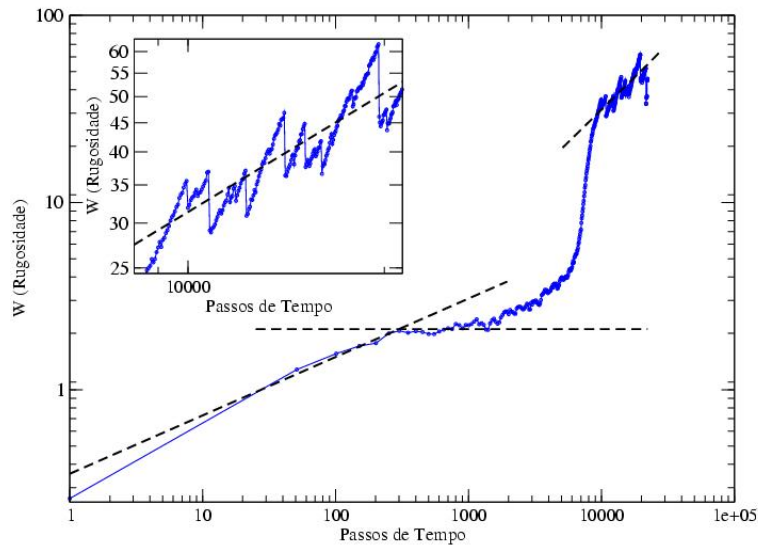


Figura 4.11 Resultado de w para a simulação na mesmas condições da simulação de tamanho $L = 2500$ da Fig. 4.9, porém os pontos estão separados de seus vizinhos por 50 passos de tempo. Existem diferentes tipos de transientes. Até o passo 1500, o enrugamento é intrínseco ao modelo de ILG, pois acontece antes da interface se aproximar dos obstáculos. Segue-se uma pequena saturação quando a interface ainda está longe dos obstáculos. A explicação do porque aparece esta primeira saturação e de seu valor ainda necessita ser investigada com maior profundidade. De 2000 a 10 mil passos se dá o contato com os primeiros obstáculos e é caracterizado por um rápido enrugamento. Por fim, chega-se ao estágio de interesse para a estimação de β , pois é o equivalente ao que acontece nos experimentos e vai do passo 10 mil até o 20 mil.

estimativa, usamos a Fig. 4.11 que corresponde a mesma simulação do caso $L = 2500$ na Fig. 4.9 porém com pontos do gráfico separados de 50 passos de tempos. A dificuldade na estimação de β aparece porque temos vários transientes na simulação e fica difícil saber qual é exatamente a região que devemos considerar. Este começa com um enrugamento intrínseco ao modelo ILG [16] seguido de uma primeira saturação antes de alcançar os obstáculos (do passo 0 ao 1500). No entanto, é necessária investigar mais detalhadamente esta saturação. Segue um crescimento muito rápido, com expoente de crescimento maior que 2, quando a interface encontra os primeiros obstáculos (do passo 1500 a 10 mil). Passados estes obstáculos, a interface continua a enrugar até saturar (do passo 10 mil ao 20 mil) e é este o regime de interesse para a estimativa do expoente β .

A interpretação é consistente com a discussão feita anteriormente para valores grandes de C_a , o que é esperado em nossa modelagem. Neste caso, o fenômeno é dominado pelas forças viscosas e encontramos o valor limite para w . Mesmo assim, é possível estimar o valor de α através da correlação altura-altura $C(l)$

$$C(l) \equiv [\langle (h(x) - h(x'))^2 \rangle_x]^{1/2}, \quad [|x - x'| = l], \quad (4.29)$$

pois este também segue uma lei de potência com expoente α :

$$C(l) \sim l^\alpha. \quad (4.30)$$

De fato, realizamos este procedimento para o passo 120 mil para a simulação com $L = (\sqrt{3}/2)2500$, o qual é ilustrado na Fig. 4.12 e o valor estimado para α é de $\approx 0,53$. Note o excelente ajuste com a lei de potência após um transiente e antes da saturação, indicando a consistência do método para estimar o expoente de rugosidade.

Em resumo, estimamos para o expoente de rugosidade α o valor de 0,53 aproximadamente e para o expoente de crescimento β valores variando de 0,6 a 0,8, em concordância com valores experimentais. Além disto, observamos que uma valor saturado para w_{sat} . Estas observações são consistentes com valores altos de C_a .

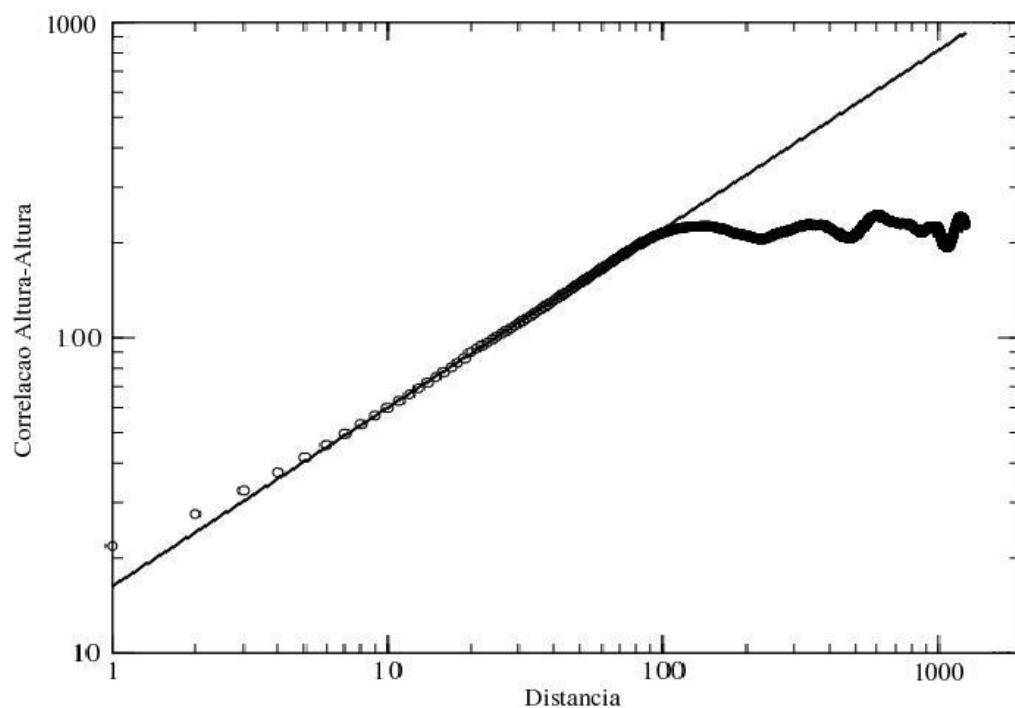


Figura 4.12 Gráfico de C_l versus l (correlação altura-altura versus a distância) para $L = 2500\sqrt{3}/2$. A inclinação da reta traçada corresponde a uma estimativa do valor do expoente de rugosidade $\alpha \approx 0,53$. Enfatizamos que a correlação "satura" para $l > 100$ com valores de $C(l)$ compatíveis com os observados para w_{sat} na Fig. 4.9.

CAPÍTULO 5

Conclusões

Esta dissertação investiga diversos aspectos do escoamento em meios porosos junto com sua simulação utilizando modelos de ACGR. A pesquisa nesta área é de interesse teórico e prático com aplicações desde a indústria dos alimentos até a extração de petróleo.

Na Introdução, começa descrevendo sucintamente o que é o ACGR, em particular o modelo de FHP, e como este pode simular o comportamento de fluidos. Em seguida apresenta uma revisão da dinâmica de fluidos nos aspectos mais importantes para esta dissertação, como por exemplo, as equações de Navier-Stokes, o número de Reynolds e a lei de Darcy. Ainda no primeiro Capítulo, foi introduzido o conceito de rugosidade de interfaces junto com seu possível comportamento de escala e os expoentes associados α (expoente de rugosidade), β (expoente de crescimento) e z (expoente dinâmico).

O Capítulo 2 descreve de maneira detalhada o modelo de FHP que lida com um único fluido, e discuti teoricamente como, a partir da dinâmica detalhada das partículas do ACGR, podemos observar comportamentos similares aos de fluidos na natureza. Por fim, apresenta a simulação do escoamento de Poiseuille.

No Capítulo 3 descreve várias extensões do modelo FHP. Em particular o modelo ILG, que lidam com dois fluidos e o modelo com espalhadores que simula escoamento em células de Hele-Shaw. Acreditamos que adicionar espalhadores ao modelo ILG seja inédito e apresentamos resultados consistentes com o fenômeno da instabilidade de Saffman-Taylor. E finalmente, este Capítulo introduz quais as modificações são necessárias para estes modelos para simular escoamentos em uma superfície cônica. Acreditamos também que estas modificações são originais.

No capítulo 4, discuti-se com maior profundidade os conceitos de escalas em interfaces e o escoamento em meios porosos. Segue apresentando resultados de nossas simulações com o ACGR para fluido único em meios porosos bidimensionais, os quais apresentam um bom acordo com os da literatura. Por fim, apresentamos a simulação de dois fluidos imiscíveis em uma célula de Hele-Shaw com obstáculos circulares através de modelos de ACGR que motivou o título da dissertação. Em particular, estudamos a interface formada pelos fluidos sob a luz dos conceitos de escala. Encontramos um colapso para w_{sat} para simulações em três tamanhos diferentes sem necessidade de fazer o procedimento descrito no Capítulo de Introdução. Isto sugere que para as redes utilizadas encontramos o valor máximo para w_{sat} . Mesmo nestas condições, foi possível estimar o coeficiente de rugosidade $\alpha \approx 0,53$ através da correlação altura-altura, cujo ajuste com lei de potência é excelente após um transiente e antes da saturação. Estimamos também que o coeficiente dinâmico β se encontra dentro do intervalo 0,6-0,8, intervalo consistente com os valores experimentais.

Vários aspectos deste trabalho ainda continuam em aberto e serão explorados pelo grupo do Prof. Maurício D. Coutinho Filho e do Dr. Renê R. Montenegro Filho.

Referências Bibliográficas

- [1] D. d’Humières, P. Lallemand, *Complex Systems* **1** 599 (1987).
- [2] E. Pauné, *Interface dynamics in two dimensional viscous flows*, Tese de Doutorado, Universitat de Barcelona (2002) e referências citadas.
- [3] A.-L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995) e referências citadas.
- [4] D. H. Rothman e S. Zaleski, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1417 (1994); *ibid*, *Lattice-Gas Cellular Automata*, Cambridge University Press, 1997.
- [5] D. H. Rothman e S. Zaleski, *LatticeGas Cellular Automata*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997) e referências citadas.
- [6] P. Tabeling e A. Libchaber, *Phys. Rev. A* **33**, 794 (1986).
- [7] J. V. Maher, *Phys. Rev. Lett*, **54** 1498 (1985).
- [8] M. G. Moore, A. Juel, J. M. Burgess, W. D. McCormick e H. L. Swinney, *Proceedings of the Seventh Experimental Chaos Conference* **676**, 189-194 (Springer-Verlag, 2003),.
- [9] <http://www.educ.fc.ul.pt/icm/icm99/icm14/koch.htm>.
- [10] J. Bear, *Dynamics of fluids in porous media*, American Elsevier (1972).
- [11] M. Sahimi, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 1393 (1993).

- [12] D. M. Tavares, L. S. Lucena, H. A. Schots, E. C. Mundim e F. J. Herrmann, *Integrated Coputer-Aided Engineering*, **60**, 25 (2005); R. F. Soares, G. Corso, J. E. Freitas, L. R. da Silva, G. Paul e H. E. Stanley, *Physica A* **343**, 739 (2004).
- [13] P. Saffman, G. Taylor, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **245**, 312 (1958).
- [14] D. Bensimon, L. Kadanoff, S. Liang, B. Shraiman, C. Tang, *Rev. Mod. Phys.*, **58**, 977 (1986).
- [15] G. M. Homsy, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **19**, 271 (1987).
- [16] A. Hernández-Machado, J. Soriano, A. M. Lacasta, M. A. Rodríguez, L. Ramírez-Piscina e J. Ortín, *Europhys. Lett.* **55**, 194-200 (2001); J. Soriano, J. Ortín e A. Hernández-Machado *Phys. Rev. E* **66**, 031603 (2002); J. Soriano, J.J. Ramasco, M. A. Rodriguez, A. Hernández-Machado e J. Ortín, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 026102 (2002); J. Soriano, J. Ortín e A. Hernández-Machado *Phys. Rev. E* **67**, 056308 (2003); J. Soriano, A. Mercier, R. Planet, A. Hernández-Machado, M. A. Rodríguez e J. Ortín, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 104501 (2005); M. Pradas e A. Hernández-Machado, *cond-mat 0609581v1* (2006).
- [17] H. Darcy, *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Dalmont, Paris, (1859).
- [18] D. H. Rothman e O. van Genabeel, *Ann. Rev. Earth Planet Sci.* **24**, 63 (1996).
- [19] D. H. Rothman e J. F. Olson, *J. Fluid Mechanics* **341**, 343, (1997).
- [20] <http://www.claymath.org/millennium/>.
- [21] U. Frisch, B. Hasslacher e Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **56** 1505 (1986).
- [22] U. Frisch, D. dHumiére, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, J. Rivet, *Complex Systems* **1**, 649 (1987).
- [23] D. A. Wolf-Gladrow, *LatticeGas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, Springer, 2000.

- [24] S Wolfram, J. Stat. Phys. **45**, 471 (1986).
- [25] D. H. Rothman e J. M. Keller, J. Stat. Phys. **52**, 1119 (1988).
- [26] K. Balasubramanian, F. Hayot e W.F. Saam, Phys. Rev. A **36**, 2248 (1987).
- [27] F. Dyson, *Disturbung the universe* (Harper and Row, New York, 1979).
- [28] K. Zuse, (1970). *Calculating Space*, MIT Project MAC, Tech. Transl. AZT-70-164-GEMIT.
- [29] J. Hardy, Y. Pomeau e O. de Pazzis, J. Math. Phys. **14**, 1746 (1973).
- [30] G. McNamara, G. Zanetti, Phys. Rev. Lett **61**, 2332 (1988).
- [31] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamom Press, New York, 1959).
- [32] G. L. Vasconcelos, *Introdução a Mecânica do Fluidos*, Notas de aula, UFPE (2004).
- [33] H. S. Hele-Shaw, Experiments on the nature of surface resistance in pipes and on ships. Trans. Inst. Naval Architects **39**, 145 (1897).
- [34] F. Family e T. Vicsek, J. Phys. A **18**, L75 (1985).
- [35] G. Zanetti, Phys. Rev. A, **40** 1539-1548 (1989).
- [36] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Second Edition (John Wiley & Sons, New York, 1987).
- [37] L. P. Viana, R. R. Montenegro-Filho, M. D. Coutinho-Filho, Anais do I Workshop da Rede de Risco Exploratória, Natal, 2004, p. 1-7.
- [38] <http://www.lmm.jussieu.fr/zaleski/latgas.html>.
- [39] L. P. Kadanoff, G. McNamara, G. Zanetti, Complex Systems **1**, 791 (1987).

- [40] R. M. Azevedo, R. R. Montenegro-Filho, L. P. Viana, M. D. Coutinho-Filho, *Anais do III Workshop da Rede de Risco Exploratória*, Natal, 2005, p. 1-4.
- [41] C. Adler, D. d'Humières e D. H. Rothman, *J. Physique I France* **4**, 29 (1994).
- [42] D. Burgess, F. Hayot e W.F. Saam, *Phys. Rev. A* **38**, 3589 (1988); D. Burgess e F. Hayot, *Phys. Rev. A* **40**, 5187 (1989).
- [43] G. L. Vasconcelos e L. P. Kadanoff, *Phys. Rev. A*, **44**, 6490 (1991); L. P. Kadannof, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2986 (1990).
- [44] R. Folch, J. Casademunt, A. Hernández-Machado e L. Ramírez-Piscina, *Phys. Rev. E*, **60**, 1734, (1999).
- [45] R. Folch, J. Casademunt, a> Hernández-Machado e L. Ramírez-Piscina, *Phys. Rev. E*, **60**, 1734, (1999).
- [46] M. P. do Carmo, *Elementos de Geometria Diferencial*, IMPA, Rio de Janeiro (1971).
- [47] J. Baez e J. P. Muniain, *Gauge fields, knots and gravity*, World Scientific (1994).
- [48] www.wolfram.com.
- [49] M. Kardar, *Phys. Rep.* **301**, 85 (1998).
- [50] M. Kardar, G. Parisi e Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [51] M. Rost, L. Laurson, M Dubé e M Alava, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 054502 (2007).
- [52] Y. -C. Zhang, *J. de Physique*, **51** 2129 (1990).
- [53] E. G. Flekkoy, S. R. Pride, *Phys. Rev. E* **60** , 4130-4037 (1999).
- [54] E. G. Flekkoy, S. R. Pride, *Phys. Rev. E* **60** , 4285-4299 (1999).

- [55] N. Gonzalez-Segredo, M. Nekovee e P. Coveney, Phys. Rev. E, **67**, 046304 (2003); P. J. Love, J.-B. Maillet e P. Coveney, Phys. Rev. E, **64**, 061302 (2001); J.-B. Maillet e P. Coveney, Phys. Rev. E, **62**, 2898 (2000).
- [56] D. H. Rothman, Geophysics **53** 509-518 (1988).
- [57] S. Chen, K. Diemer, G. D. Doolen, K. Eggert, C. Fu, S. Gutman, B. J. Travis, Physica D **47** 72-84 (1991).
- [58] J. S. Andrade, U. M. S. Costa, M. P. Almeida, H. A. Makse, H. E. Stanley, Phys. Rev Lett. **82**, 5249 (1999).
- [59] E. Pauné e J. Casademunt, Phys. Rev. Lett., **90**, 144504 (2003).
- [60] D. S. Fisher, Phys. Rep. **301**, 113 (1998).
- [61] Y. Méheust, G. Lovoll, K. J. Maloy e J. Schmittbul, Phys. Rev. E, **66**, 051603 (2002).
- [62] M. Cieplak e M. Robbins, Phys. Rev. Lett. **60**, 20, 2042 (1988); I. Hecht e H. Taitelbaum, Phys. Rev. E **70**, 0416307 (2004).
- [63] M. A. Rubio, C. A. Edwards, A. Dougherty e J. P. Gollub, Phys. Rev. Lett. **63**, 1685 (1989).
- [64] M. Ferer, G. S. Brohal e D. H. Smith, Phys. Rev. E **71** 026303 (2005).
- [65] S. He, G. L. M. K. S. Kahanda e P.-Zen Wong Phys. Rev. Lett. **69**, 3731 (1992).
- [66] V. K. Horváth, F. Family e T. Vicsek, J. Phys. A **24**, L25 (1991).
- [67] E. Aker e K. J. Maloy, Phys. Rev. E, **61**, 2936 (2000).
- [68] O. I. Frette, K. J. Maloy e J. Schmittbul, Phys. Rev. E, **55**, 2969 (1997).

- [69] J. P. Stokes, D. A. Weitz, J. P. Gollub, A. Dougherty, M. O. Robbins, P. M. Chaikin e H. M. Lindsay, Phys. Rev. Lett. **53**, 1718 (1986).
- [70] C. S. Nolle, B. Koiller, N. Marys e M. O. Robbins, Phys. Rev. Lett., **71**, 2074 (1993).
- [71] D. A. Kessler, H. Levine e Y. Tu, Phys. Rev. A, **43**, 4551 (1991).
- [72] E. G. Flekkoy e D. H. Rothman, Phys. Rev. E **53**, 1622 (1996).

